

Document de synthèse
pour
l'habilitation à diriger les recherches

Université de Nantes

Mathématiques appliquées

Yves COUDIERE

***Contributions à l'analyse numérique de méthodes de volumes
finis, à la modélisation et au calcul en électrocardiologie***

Soutenue le 2 juillet 2009

Rapporteurs :

Didier BRESCH, Directeur de recherche
Piero COLLI-FRANZONE, Professeur
Benoît PERTHAME, Professeur

CNRS (Université de Savoie)
Université de Pavie (Italie)
UPMC (Paris 6)

Jury :

Christophe BERTHON, Professeur
Didier BRESCH, Directeur de recherche
Flavien CHARPENTIER, Directeur de recherche
Stéphane CLAIN, Professeur
Jean-Antoine DÉSIDÉRI, Directeur de Recherche
Benoît PERTHAME, Professeur

Université de Nantes
CNRS (Université de Savoie)
INSERM (Université de Nantes)
Université Paul Sabatier (Toulouse 3)
INRIA (Sophia-Antipolis)
UPMC (Paris 6)

Remerciements

Je suis d'abord très reconnaissant envers Didier Bresch, Piero Colli-Franzone et Benoît Perthame qui ont accepté d'être mes rapporteurs sur ce mémoire. Je suis très honoré qu'ils aient donné leur avis de spécialiste sur mes travaux de recherche. Je les remercie de l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail, de la précision et de la justesse de leurs commentaires.

Je remercie Christophe Berthon, Flavien Charpentier, Stéphane Clain et Jean-Antoine Désidéri pour avoir accepté d'être membres du jury. J'apprécie en particulier l'intérêt et l'effort de lecture de Flavien Charpentier qui n'est pas mathématicien.

Jean-Antoine Désidéri m'a dirigé vers les mathématiques appliquées à l'électrocardiologie, puis soutenu dans cette voie qui était nouvelle pour moi. J'ai par ailleurs beaucoup appris sous son parrainage. Je lui suis sincèrement très reconnaissant pour le temps qu'il m'a consacré depuis 2001 à l'INRIA et pour tout ce qu'il m'a appris. J'apprécie donc tout particulièrement qu'il ait présidé le jury.

Je remercie aussi tous les chercheurs de l'INRIA avec qui j'ai travaillé et en particulier A. Dervieux.

Je remercie Y. Bourgault pour ses grandes qualités scientifiques mais aussi son inébranlable bonne humeur et sa très grande gentillesse. J'apprécie beaucoup notre collaboration et nos multiples rencontres dans nos universités respectives.

Bien entendu mon travail d'enseignant chercheur a été facilité et très bien soutenu par le laboratoire de Mathématiques Jean Leray et le département de Mathématiques de L'Université de Nantes.

Je tiens ensuite à remercier François Jauberteau qui m'a très chaleureusement accueilli à mon arrivée à Nantes en 2001, puis conseillé et encouragé dans mon travail d'enseignant-chercheur.

De plus, j'ai beaucoup appris de la tâche d'un directeur de thèse grâce à Charles Pierre. Je le remercie pour son sourire permanent, sa très grande ouverture d'esprit et curiosité scientifique. Il a été très agréable et enrichissant de travailler à ses côtés. Je souhaite que nous continuions.

J'adresse deux remerciements particuliers à Rodolphe Turpault, compagnon du quotidien d'un enseignant chercheur en mathématiques appliquées, et à Maxime Sermesant, toujours ouvert vers des disciplines éloignées de ses priorités.

Je renouvelle mes remerciements à P. Villedieu et J.-P. Vila, qui m'ont guidé à mes débuts.

Et finalement je remercie tous mes autres collaborateurs sans qui mes travaux n'auraient pas abouti : Florence, Marco, Mihaela et tous les autres.

Table des matières

Introduction	7
1 Électrocardiologie	11
1.1 Modèles mathématiques en électrocardiologie	11
1.1.1 La cellule excitable	12
1.1.2 Le tissu excitable	13
1.1.3 L'organe	15
1.1.4 L'électrocardiogramme	15
1.2 Les équations monodomaines	16
1.2.1 Application en imagerie médicale et bioingénierie	16
1.2.2 Analyse et analyse numérique de la méthode des volumes finis . . .	19
1.3 Les équations bidomaines	24
1.3.1 Existence et unicité des solutions pour le modèle de coeur isolé . . .	26
1.3.2 Un problème de calcul scientifique : l'électrocardiogramme	31
1.4 L'équation eikonale	33
2 Méthodes de volumes finis	37
2.1 Le schéma « diamants »	38
2.1.1 Présentation du schéma	38
2.1.2 Principe de l'analyse	41
2.1.3 Le problème de convection-diffusion	44
2.1.4 Convergence sur des maillages de quadrangles	44
2.1.5 Convergence sur des maillages de rectangles raffinés localement . . .	45
2.1.6 Inégalités de Sobolev	46
2.2 Méthodes Volumes Finis DDFV	47
2.2.1 Analyse numérique d'une méthode à 2 maillages en 3D	47
2.2.2 Analyse numérique d'une méthode à 3 maillages en 3D	50
2.2.3 Convergence du schéma DDFV en 2D pour l'équation de convection- diffusion linéaire	53
2.3 Convergence d'un schéma volumes finis pour des systèmes hyperboliques linéaires symétriques en domaines bornés	55
Travaux de l'auteur	57
Références	61

Introduction

Ce document comprend 2 chapitres qui résument mes contributions à la modélisation mathématique, analyse, analyse numérique et calcul scientifique en électrocardiologie d'une part, et à l'analyse numérique de méthodes de volumes finis d'autre part. Ces contributions représentent l'ensemble de mon travail de recherche, qui s'étend de l'étude de questions mathématiques pour des systèmes d'équations aux dérivées partielles et leur approximation numérique à l'application de ces mathématiques dans les champs de l'imagerie médicale ou de la biologie/bioingénierie.

Le premier chapitre décrit quelques problèmes et résultats mathématiques de l'étude du fonctionnement électrique du coeur, dont une mesure habituelle est l'électrocardiogramme. A.D. Waller a enregistré le premier électrocardiogramme humain en 1887 [108] et le terme électrocardiogramme (ECG) est dû à W. Einthoven en 1893. Nous lui devons aussi les premières descriptions et études scientifiques de l'ECG, la dénomination des ondes, P, Q, R, S et T et le placement standard des premières électrodes de mesures (triangle de Einthoven), [63, 62]. Ce n'est qu'en 1942 que l'ensemble des 12 dérivations actuelles est définitivement arrêté. L'étude clinique des signaux électrique ainsi enregistrés continue bien sur aujourd'hui. Dans ce cadre, le fonctionnement du coeur est principalement compris à partir d'une description utilisant des dipôles électrique mobiles. L'objectif est ici de comprendre la relation entre le fonctionnement électrique du coeur et les mesures du champ électrique qu'il induit (l'ECG), et de donner des renseignements sur les pathologies observées.

Le coeur est un organe complexe composé de multiples tissus « excitables ». À l'autre extrémité de l'échelle, les physiologistes étudient, depuis le travail de A. Hodgkin et A. Huxley en 1952 [80], les cellules excitables. Ce sont des cellules dont le potentiel électrique de membrane (entre les milieux intra et extracellulaire) peut brutalement changer de signe sous l'effet d'une petite perturbation. C'est ce qu'on appelle le potentiel d'action. Le fonctionnement de ces cellules, individuellement, est très bien décrit dans les travaux d'électrophysiologie, par des systèmes d'équations différentielles.

Les mathématiciens s'emparent assez rapidement du problème de la propagation du

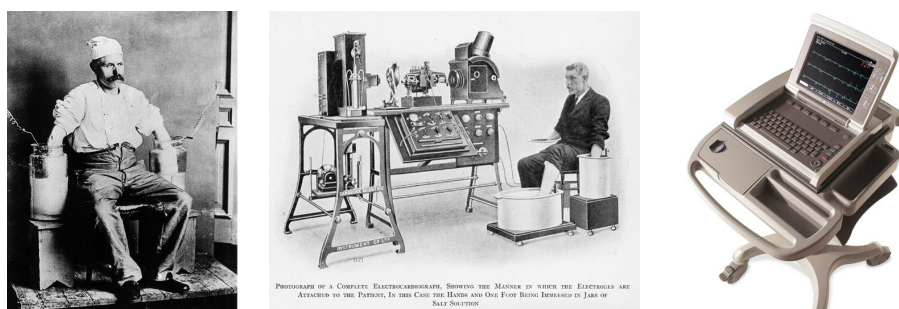


FIG. 1 – Systèmes d'enregistrement des ECG de Einthoven et un équipement moderne

potentiel d'action (propagation du potentiel d'action de proche en proche) à la suite de R.A. FitzHugh [68] : après avoir simplifié les modèles de cellule, il s'agit d'étudier des équations de réaction-diffusion, existence de solutions, existence d'ondes progressives, ondes spirales, leur stabilité, etc.

C'est finalement dans les années 1970 qu'est introduite la description mathématique d'un tissu excitable comme un milieu continu, le modèle bidomaine [104]. Il s'agit d'un système *dégénéré* d'équations de réaction-diffusion, qui n'est pas standard. Sa dérivation par homogénéisation [89] a été étudiée [93], mais plusieurs problèmes de modélisation demeurent (insertion d'un tissu dans un autre, conditions d'interfaces avec le milieu extérieur). Dès les années 1980, l'approximation numérique des solutions de ce système, ou plus généralement de la propagation du potentiel d'action est initié par P. Colli-Franzone [52, 50]. Ces travaux formalisent l'idée que le front montant de dépolarisation observé dans les solutions du modèle bidomaine est suffisamment raide pour être plus simplement décrit par une équation eikonale, et que la disposition de nappes de dipôles sur ce front décrit bien la partie de l'ECG correspondante à la dépolarisation des ventricules (QRS).

Le système bidomaine en lui même est beaucoup plus riche que cela et susceptible d'être encore enrichi par des modèles réalistes d'électrophysiologie. Pour autant, l'étude mathématique du système bidomaine est très récente (années 2000), largement incomplète, et l'approximation ainsi que le calcul numérique de ses solutions en 2D ou 3D (depuis les années 1990) se heurtent à de nombreuses difficultés (voir par exemple [70, 102]) : complexité des modèles de membrane cellulaire avec de multiples échelles de temps, fronts raides dans les solutions, dégénérescence des équations, etc.

Au delà de l'intérêt mathématique que présentent ces équations, il découle de leur capacité à expliquer ou décrire le fonctionnement d'un tissu excitable des interactions enrichissantes, principalement en électrophysiologie et en imagerie médicale pour l'instant. Ce sont en effet ces équations qui prétendent décrire, à partir des modèles à l'échelle microscopique (la cellule), le comportement à une échelle macroscopique d'un ensemble de cellules, homogène ou hétérogène. C'est le sens des ondes P, Q, R, S et T de l'ECG qui est en question. Grâce à des résultats de simulation numérique validés, des études récentes ont été réalisées sur la relation entre l'ECG et les propriétés d'hétérogénéité d'un tissu excitable monodomaine ou bidomaine [55, 72, 73, 56, 71, 105]. En imagerie médicale, l'objectif est d'améliorer les procédés d'imagerie en utilisant des mesures électriques et des modèles permettant de les interpréter.

Malheureusement, l'ECG n'est explicable que par la complexité du coeur en tant qu'organe constitué d'un assemblage de différents tissus excitables à différentes échelles. Étudier l'imbrication de ces différentes échelles de modélisation, de la cellule à l'organe, et leur influence sur les phénomènes observés, via différentes modalités (électrodes intracardiaques, imagerie, ECG, etc) est un vaste programme de recherche.

Après une brève introduction des modèles de cellules et de tissu excitables (équations bidomaines et équations monodomaines), le premier chapitre de ce document décrit différentes contributions à leur étude. Il est divisé en 3 sections.

1. La première synthétise d'une part les résultats de collaborations avec des chercheurs en imagerie et biologie à propos de simulation numérique des équations monodomaines et d'autre part résume l'analyse numérique d'un schéma numérique pour les équations monodomaines, où l'on montre des résultats de stabilité et de convergence. Cette section est complétée par une étude numérique de la discrétisation des équations monodomaines, permettant de comprendre les difficultés pratiques de celle-ci (pas d'espace, discrétisation en temps, convergence en maillage).

2. Dans la seconde section, on s'intéresse uniquement aux équations bidomaines. On donne en particulier une technique de démonstration d'existence de solutions (fortes et faibles), et un résultat (partiel) d'unicité. Cette partie est aussi complétée par une étude numérique, dans laquelle on s'efforce d'obtenir des résultats concernant des pathologies simples, tachycardie et ischémie, à partir de modèles de cellules physiologiques.
3. La troisième partie montre une tentative d'utilisation en médecine clinique de la modélisation du front de dépolarisation par une équation eikonale. Les schémas monotones et les algorithmes de résolution rapide de type *fast marching* [99] permettent d'obtenir des résultats assez rapidement pour les contraintes pratiques de la médecine clinique.

Le second chapitre résume des contributions en analyse numérique de schémas volumes finis. Dans de nombreux domaines, dont l'électrocardiologie, les méthodes de volumes finis sont appréciées pour leur robustesse et leur simplicité. Au contraire des méthodes d'éléments finis, basées sur des formulations variationnelles, les méthodes de volumes finis sont utilisées pour des équations aux dérivées partielles sous forme conservative, c'est à dire de la forme générale $\text{div}(\phi(x, u, \nabla u)) = f(x)$. Pour une équation sous cette forme posée dans un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, l'approximation est une fonction constante par morceaux sur un découpage de Ω en volumes de contrôle notés K , qui sont des polyèdres. Le principe de la méthode des volumes finis est d'intégrer l'équation sur chacun des volumes de contrôle, de manière à obtenir autant d'équations que l'on a d'inconnues. En utilisant la formule de Green, les équations sont $\int_{\partial K} \phi(x, u, \nabla u) \mathbf{n}_K ds = \int_K f dx$ pour tout K , où \mathbf{n}_K est la normale unitaire au bord de K , sortante de K . Puisque les K sont des polyèdres qui forment une partition de Ω , il suffit de savoir exprimer les flux $\int_{\sigma} \phi(x, u, \nabla u) \mathbf{n}_{\sigma} ds$ à travers les interfaces $\sigma = \bar{K} \cap \bar{L}$ entre deux volumes de contrôle K et L , ou des faces $\sigma = \partial K \cap \partial \Omega$ du bord de Ω .

Un schéma intéressant doit être au moins conservatif et avoir des flux consistant, au sens de la formule de Taylor.

Le cas hyperbolique ($\phi = \phi(x, u)$) est très bien étudié, en particulier à partir de résultats en mécanique des fluides numérique, depuis les années 1980. Mais si l'équation contient un terme de diffusion, le flux dépend de la dérivée ∇u , alors que l'approximation discrète est simplement constante par morceaux. Je me suis essentiellement intéressé à la difficulté de construire des flux de diffusion, c'est à dire qui dépendent de ∇u .

Dans le cas linéaire, le flux de diffusion est $\int_{\sigma} G \nabla u \cdot \mathbf{n}_{\sigma}$ où G est une matrice de diffusion. Le terme $G \nabla u \cdot \mathbf{n}_{\sigma}$ exprime la dérivée de u dans la direction $G \mathbf{n}_{\sigma}$. La première idée, de R. Herbin [76], est d'approcher cette dérivée à partir de la différence finie $u(x_K) - u(x_L)$ où x_K et x_L sont des points dans les volumes de contrôle voisins de σ . Naturellement, puisque $x_L - x_K$ doit être la direction $G \mathbf{n}_{\sigma}$, cette idée fonctionne mal, ou plus du tout, si la situation se complique : sur des maillages très généraux, raffinés localement ou distordus, pour des problèmes avec une forte anisotropie, pour les équations bidomaine ayant deux termes de diffusions différents, ou plus généralement pour des problèmes non linéaire, comme le p-laplacien, pour lesquels tout le gradient doit être connu.

On peut résoudre ce problème de plusieurs manières différentes. Parmi celles-ci, on trouve les schémas diamants et les schémas DDFV. Les premiers sont une généralisation du schéma de départ, dans lequel on reconstruit tout le gradient de l'approximation sur chaque interface σ de manière consistante, en introduisant des valeurs auxiliaires au sommets du maillage. Ces valeurs auxiliaires sont interpolées à partir de l'inconnue principale. Les deuxième schémas utilisent la formule du schéma diamant pour définir un

gradient discret par interface σ , mais cette fois les valeurs aux sommets sont de nouvelles inconnues. En 2D, le système d'équations à résoudre est augmenté en écrivant un second schéma de volumes finis sur un maillage construit autour des sommets du maillage de départ, et en exprimant les flux grâce au même gradient discret. Ces méthodes ont une propriété algébrique essentielle qui est analogue à la formule de dualité $(\operatorname{div}(u), q) + (u, \nabla q) = \langle q(u \cdot \mathbf{n}) \rangle$ pour des variables vectorielles et scalaires u et q , d'où elles tirent leur nom, *Discrete Duality Finite Volume*. La généralisation en dimension 3 de ce principe de discrétisation, reposant sur une construction géométrique et une propriété algébrique n'est pas immédiate. J'ai proposé deux généralisations, conservant les bonnes propriétés du schéma en 2D, d'une part avec C. Pierre [1] pendant sa thèse, et d'autre part avec F. Hubert [15].

Puisqu'il a été observé que les schémas DDFV sont robustes et approchent précisément les gradients (benchmark FVCA, [77]), nous avons décidé, avec G. Manzini, d'utiliser ces gradients pour construire des schémas d'ordre 2 aussi pour des flux de convection [2]. L'objectif est ici de construire des schémas pour des problèmes hyperboliques non linéaires.

Mon travail dans ce domaine est de fournir des preuves mathématiques des bonnes propriétés de schémas volumes finis, consistance, stabilité, convergence, etc, au moins pour des problèmes modèles représentant les grandes classes d'EDP. C'est ce que résume ce second chapitre, divisé en 3 parties.

1. La première partie concerne le schéma diamant, et rappelle mes contributions à l'analyse numérique de celui-ci.
2. La seconde partie détaille la construction de schéma DDFV. On décrit d'abord les deux schémas obtenus en 3D, le premier utilisant 2 maillages volumes finis et le second utilisant 3 maillages volumes finis, se généralisant plus naturellement aux dimensions supérieures. Enfin l'utilisation du schéma DDFV pour construire un schéma d'ordre deux pour un problème de convection-diffusion est expliquée.
3. La dernière partie concerne une contribution datant de ma thèse à l'analyse numérique des schémas volumes finis pour les systèmes hyperboliques linéaires symétriques (systèmes de Friedrichs), et en particulier comment discrétiser de manière dissipative la condition au bord, et obtenir des estimations d'erreurs en $h^{1/2}$.

Chapitre 1

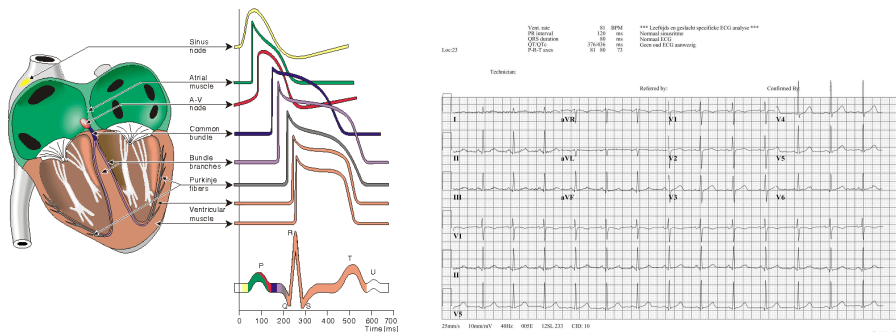
Électrocardiologie

Ce chapitre introduit les équations mathématiques servant à la modélisation de cellules excitables, de tissus cellulaires excitables et du coeur dans son ensemble, au sein du thorax. Cette introduction est suivie de résumés de mes contributions en analyse, analyse numérique, calcul scientifique pour ces modèles et de quelques applications en biologie et en imagerie médicale.

1.1 Modèles mathématiques en électrocardiologie

Le tissu musculaire cardiaque est constitué de cardiomyocyte, des cellules excitables et contractiles. Les cellules excitables propagent un *potentiel d'action*, décrit ci-dessous, qui, à son tour, cause la contraction, responsable de l'éjection du sang dans les artères.

Dans le coeur l'excitation électrique (le potentiel d'action) est issue du noeud sinusal (noeud SA) puis se propage dans les oreillettes. Une paroi non excitable sépare les oreillettes des ventricules. Cette paroi laisse un passage unique au potentiel d'action au noeud auriculo-ventriculaire (noeud AV), où l'excitation est ralentie. Le potentiel d'action se propage alors rapidement à travers le *réseau spécial de conduction*, constitué de fibres musculaires spécifiques¹, jusqu'au coeur des ventricules, puis à travers le tissu ventriculaire [100].



(a) PA dans le coeur

(b) Électrocardiogramme

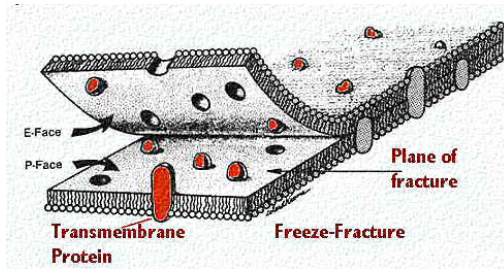
FIG. 1.1 – Fonctionnement électrique du coeur

¹faisceau de His et fibres de Purkinje

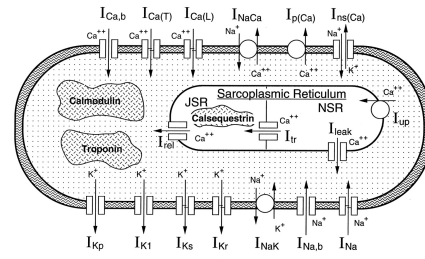
Le front d'excitation produit un champ électrique extérieur au coeur. La mesure de ce champ électrique à la surface du thorax constitue un outil de diagnostic commun : l'électrocardiogramme. Ce fonctionnement est bien décrit dans des ouvrages de référence comme [81, 87].

1.1.1 La cellule excitable

La membrane cellulaire est constituée d'une double couche de phospholipides, qui lui donne un rôle capacitif. Cette membrane sépare de manière imperméable les milieux intra et extracellulaires. Bien qu'imperméable, elle permet le passage *contrôlé* d'espèces ioniques entre ces deux milieux. Le « contrôle » physiologique des échanges ioniques donne aux cellules leurs caractéristiques électriques. La membrane cellulaire de chaque cellule est dotée d'un potentiel électrique de repos (potentiel de Nernst) négatif, mais les cellules excitables sont capables de renverser brutalement celui-ci et de maintenir cette « dépolarisation » pendant quelques centaines de ms avant de revenir à leur potentiel de repos. Cette dépolarisation/repolarisation que l'on appelle aussi potentiel d'action se propage de proche en proche, provoquant une « onde de dépolarisation ».



(a) Membrane cellulaire



(b) Modèle de Luo et Rudy, Phase II

FIG. 1.2 – La cellule excitable

Formalisme de Hodgkin et Huxley

Les modèles de cellule que nous utilisons sont issus de la littérature d'électrophysiologie². Ils sont écrits suivant le formalisme de Hodgkin et Huxley datant de 1952 [80], à l'aide de variables de portes modélisant le contrôle physiologique de l'ouverture/fermeture des canaux ioniques (et des autres structures de passage des ions). Dans les modèles les plus complexes, des échanges ou des phénomènes de stockage à l'intérieur de la cellule peuvent être pris en compte. Dans les calculs que nous avons mis en oeuvre, nous avons utilisé des modèles de type Luo-Rudy I [86] ou II [85] et des variantes de ces modèles, par exemple [103] pour des cellules humaines.

Pour résumer, chaque système de passage des ions est spécifique et produit un courant à travers la membrane. Chacun de ces courants dépend de l'état physiologique de la cellule et de son environnement, concentrations ioniques, potentiel de membrane, variables de porte, autres paramètres (drogues, pH , ...). La somme de tous ces courants est le *courant*

²sur le projet [CellML](#)

ionique de membrane qui s'écrit

$$I_{ions} = I_{ions}(V_m; [X_1], \dots, [X_M]; w_1, \dots, w_N) \quad (1.1)$$

$$\frac{dw_j}{dt} = f_j(t; V_m; w_1, \dots, w_N) \quad (1.2)$$

$$\frac{d[X_i]}{dt} = \lambda I_{X_i}(t, V_m, \dots) \quad (1.3)$$

où V_m est le potentiel de membrane, $[X]_{i,e}$ sont des concentrations intra et extracellulaires et w sont des variables auxiliaires, par exemple des variables de porte.

La membrane de la cellule ayant un rôle capacitif, l'équation électrique à travers un élément de surface de membrane s'écrit

$$C_m V'_m(t) + I_{ions} = 0, \quad (1.4)$$

où C_m est une *capacité par unité de surface*

C'est ce courant ionique I_{ions} qui apparaît dans les modèles de tissus à l'échelle macroscopique.

Modèles simplifiés

Les mathématiciens se sont rapidement emparés du formalisme de Hodgkin et Huxley pour comprendre la dynamique de la membrane cellulaire, et plus particulièrement du potentiel de membrane V_m . Des modèles simplifiés, ne décrivant pas la dynamique des espèces ioniques et des variables de porte, sont apparus dès les années 1960. C'est le fameux modèle de FitzHugh-Nagumo [68] pour les neurones.

Concernant le coeur, des modèles simples sont apparus dans les années 1990 avec la possibilité informatique de simulations tridimensionnelles de l'excitation cardiaque. Parmi ceux-ci, nous utilisons principalement le modèle de R. Aliev et A. Panfilov de 1996 [37]. Des modèles plus sophistiqués sont apparus plus récemment [88, 67, 49].

Tous ces modèles s'écrivent

$$I_{ions} = F(V_m, w) \quad (1.5)$$

$$w'(t) = G(V_m, w) \quad (1.6)$$

où $w : t \mapsto w(t) \in \mathbb{R}^m$ et $m \in \{1, 2\}$. La plupart du temps les fonctions F et G sont polynomiales en V_m et w . Toutefois, les coefficients peuvent parfois dépendre non linéairement de V_m et w .

1.1.2 Le tissu excitable

À l'échelle microscopique, les cardiomyocytes sont de forme cylindrique et allongée. Ils forment un réseau quasi-périodique dans lequel les extrémités et les faces des cellules sont reliés entre-eux par les *gap junctions*, qui permettent la propagation de l'excitation d'une cellule à l'autre. Ce réseau de cellules allongées est lui même organisé en fibres qui s'enroulent pour former un tissu cardiaque. Avec des cellules de 5 à 10 μm de rayon, au plus 100 μm de longueur, occupant de l'ordre de 80% du volume, on calcule qu'il y a environ 10^8 cellules par cm^3 . Un ventricule dont le muscle occupe 100 cm^3 contient 10^{10} cellules. Bien évidemment ni l'état, ni la disposition des cellules individuellement n'est accessible à la mesure ou à l'observation. Concernant un tissu, on ne dispose que d'information à une

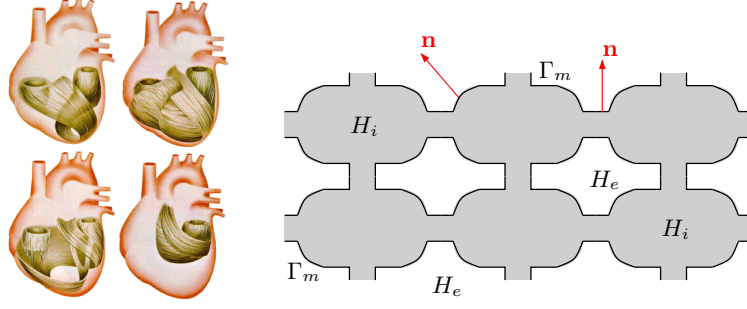


FIG. 1.3 – Fibres musculaires

échelle plus grossière. Un tissu excitable est donc traditionnellement décrit à l'aide d'un *modèle homogénéisé* [89, 93]. Celui-ci décrit l'évolution de deux potentiels, ϕ_i le potentiel intracellulaire et ϕ_e le potentiel extracellulaire. Appelé *modèle bidomaine* [81, 57, 70], il a la forme

$$A_m (C_m \partial_t V_m + I_{ions} - I_{stim,i}) = \operatorname{div}(G_i \nabla \phi_i) \quad (1.7)$$

$$A_m (C_m \partial_t V_m + I_{ions} + I_{stim,e}) = -\operatorname{div}(G_e \nabla \phi_e) \quad (1.8)$$

où $V_m = \phi_i - \phi_e$, les tenseurs $G_{i,e}$ sont des conductivités électriques anisotropes, et avec les conditions de flux de courant nul

$$G_i \nabla \phi_i \cdot \mathbf{n} = 0, \quad G_e \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (1.9)$$

pour un tissu électriquement isolé représenté par un domaine borné $H \subset \mathbb{R}^d$. Dans ces équations, $I_{stim,i}$ et $I_{stim,e}$ sont des courants de stimulation externes. Ils sont nuls en général, mais parfois utilisés pour représenter l'action d'une électrode de stimulation cardiaque. Nous verrons que l'on doit avoir $\int_H I_{stim,i} + I_{stim,e} = 0$ pour que le problème soit bien posé.

Pour la mise à l'échelle de l'équation (1.4), on utilise le rapport A_m de surface de membrane cellulaire par unité de volume, typiquement

$$A_m = 2000 \text{ cm}^{-1}. \quad (1.10)$$

Les conductivités $G_{i,e}$ s'écrivent comme des matrices 3×3 toutes les deux diagonales dans la base de Freinet associée à la fibre musculaire :

$$G_{i,e}(x) = R(x) \begin{pmatrix} g_{i,e}^1(x) & & \\ & g_{i,e}^2(x) & \\ & & g_{i,e}^3(x) \end{pmatrix} R(x)^T \quad (1.11)$$

où $R(x)$ est la matrice de passage associé à la base de Freinet de la fibre en x .

Notons pour terminer que

- l'écriture de $G_{i,e}$ reflète l'anisotropie du tissu excitable à l'échelle macroscopique ;
- les fibres sont tangentes sur les bords physiologiques d'un tissu excitable, comme les ventricules ou les oreillettes, voir la propriété 1.1 ci-dessous.

Propriété 1.1 (Fibres tangentes au bord) Les tenseurs $G_{i,e}(x)$ ont leurs coefficients dans $C^1(\bar{H})$ et l'on a

$$\forall x \in \Sigma \quad \forall \mathbf{t}(x) \text{ tangent à } \Sigma, \quad G_{i,e}(x) \mathbf{n}_\Sigma(x) \cdot \mathbf{t}(x) = 0$$

où $\Sigma = \partial H$, $\mathbf{n}_\Sigma(x)$ est la normale à Σ unitaire et sortante de H .

1.1.3 L'organe

La propagation complète du potentiel d'action dans le coeur est illustrée par la figure 1.1(a). C'est un phénomène complexe qui requiert une compréhension profonde de l'imbrication des différentes cellules à toutes les échelles.

Par exemple, le faisceau de His est bien identifié comme un faisceau unidimensionnel homogène et isolé de cellules dont le parcours constitué d'une branche principale issue du noeud AV et se divisant en deux branches associées aux ventricules gauche et droit. Ces branches se divisent en multiples fibres appelées fibres de Purkinje dont les terminaisons sont à l'échelle de la cellule et sont situées au coeur des ventricules. La modélisation des réseaux multiéchelles de conduction et de son interaction avec le tissu ventriculaire est une difficulté majeure pour comprendre le fonctionnement du coeur dans son ensemble. Elle a été très peu abordée jusqu'à maintenant, mais fait partie du programme de recherche du projet ANR MOMME³.

1.1.4 L'électrocardiogramme

Au contraire de ce qui est écrit en (1.9), le coeur n'est pas isolé électriquement. Les tissus environnant, formant le thorax sont considérés comme conducteurs et électriquement passif, de conductivité électrique g_T isotrope et soumis à un potentiel électrique ϕ_T issu du fonctionnement électrique du coeur. La mesure de ce potentiel à la surface du thorax est un outil de diagnostic classique en électrocardiologie, l'électrocardiogramme (ECG). Il est important de comprendre ce que signifie chacun des signaux observés sur un ECG, comment relier celui-ci aux fronts de dépolarisation/repolarisation des cellules du muscle cardiaque, à l'organisation des différents tissus (oreillettes, ventricules, réseau spécial de conduction), ...

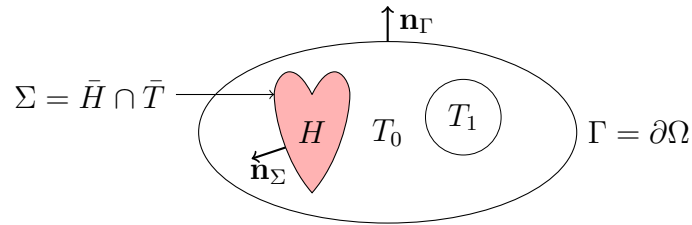


FIG. 1.4 – Coeur H dans le thorax $T = \cup_j T_j$, $\Omega = H \cup \Sigma \cup T$

Le thorax est éventuellement non homogène, pour tenir compte de la distinction entre les tissus du thorax, os, poumons, etc.

Avec les notations de la figure 1.4, le système bidomaine complet est donc constitué des équations (1.7), (1.8) et des modèles ioniques (1.1)-(1.3) dans le domaine H , de l'équation de l'électrostatique

$$-\operatorname{div}(g_T \nabla \phi_T) = 0 \quad \text{dans } T, \quad (1.12)$$

avec $g_T > 0$ et des conditions d'interface

$$G_i \nabla \phi_i \cdot \mathbf{n}_\Sigma = 0, \quad G_e \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n}_\Sigma = g_T \nabla \phi_T \cdot \mathbf{n}_\Sigma \quad \text{sur } \Sigma \quad (1.13)$$

et de bord

$$g_T \nabla \phi_T \cdot \mathbf{n}_\Gamma = 0 \quad \text{sur } \Gamma. \quad (1.14)$$

³voir www.math.sciences.univ-nantes.fr/~coudiere/momme.

Les conditions (1.13) expriment que le milieu intracellulaire est isolé alors que le flux de courant normal est continu à travers l'interface entre les milieux extracellulaires et extracardiaques [89].

En les ajoutant, les équations (1.7) et (1.8) peuvent aussi se réécrire

$$A_m (C_m \partial_t V_m + I_{ions}) = -\operatorname{div}(G_e \nabla \phi_e), \quad (1.15)$$

$$\operatorname{div}(G_i \nabla \phi_i) + \operatorname{div}(G_e \nabla \phi_e) = 0 \quad (1.16)$$

dans H .

Ce problème est bien posé (avec ϕ_e, ϕ_i, ϕ_T définis à une constante près), et on se donne une condition initiale sur V_m et les modèles ioniques (concentrations et modèles ioniques)

$$V_m(0) = V_m^{(0)}, \quad (1.17)$$

$$[X_1](0) = X_1^{(0)}, \dots, [X_M](0) = X_M^{(0)}, \quad (1.18)$$

$$w_1(0) = w_1^{(0)}, \dots, w_N(0) = w_N^{(0)}. \quad (1.19)$$

Les différentes dérivations de l'électrocardiogramme sont obtenues à partir des valeurs $\phi_T(x_j, t)$ à des points x_j du thorax. Les dérivations cliniques sont des combinaisons linéaires des potentiels relevés.

1.2 Les équations monodomaines

Le modèle monodomaine est obtenu à partir des équations (1.15)-(1.16) en faisant l'hypothèse

- que les conductivités intra et extracellulaires sont partout proportionnelles,

$$\exists \lambda \in \mathbb{R}, \quad G_i(x) = \lambda G_e(x) \text{ (p.p. } x \in H),$$

- que le coeur est isolé, équations (1.9).

Puisque les fibres musculaires sont partout tangentes au bord, les conditions aux limites se simplifient et le système monodomaine pour *un tissu isolé* est

$$A_m (C_m \partial_t V_m + I_{ions}) = \operatorname{div}(G \nabla V_m) \quad (1.20)$$

avec le modèle ionique (1.1)-(1.3), la condition aux limites

$$G \nabla V_m \cdot \mathbf{n}_\Sigma = 0 \quad (1.21)$$

et où l'on a pris

$$G(x) = \frac{1}{1+\lambda} G_i(x) = \frac{\lambda}{1+\lambda} G_e(x) = (G_i^{-1}(x) + G_e^{-1}(x))^{-1}. \quad (1.22)$$

1.2.1 Application en imagerie médicale et bioingénierie

Dans le cadre des projets ICEMA et ICEMA-2 de l'INRIA, et pour la thèse de M. Sermesant [98], nous avons étudié et simulé numériquement le modèle monodomaine avec

V_r	V_s	V_a	K	$C_m \varepsilon$	A_m	G
-80	-50	20	$3 \cdot 10^{-5}$	10^{-3}	2000	1 à 5

TAB. 1.1 – Paramètres du modèle de Aliev-Panfilov pour une cellule ventriculaire.

a	k	ϵ	d
0.30	0.03	10^{-3}	500

TAB. 1.2 – Paramètres adimensionnés du modèle de Aliev-Panfilov en [s] et [cm].

une version simplifiée du modèle ionique Aliev-Panfilov [37], ne tenant pas compte de l'effet *Bowditch*⁴, qui s'écrit

$$I_{ions}(V_m, w) = -\frac{1}{\varepsilon} (KF(V_m) - w(V_m - V_r)), \quad (1.23)$$

$$\partial_t w = K(V_m - V_r)(V_s + V_a - V_m + V_r) - w, \quad (1.24)$$

avec

$$F(V_m) = -(V_m - V_r)(V_m - V_s)(V_m - V_a), \quad V_r < V_s < V_a. \quad (1.25)$$

Les potentiels, V_r , V_s et V_a sont respectivement des potentiels de repos, de seuil et d'activité. Les échelles de temps et d'espace utilisées pour ce modèle sont en général la seconde [s] et le centimètre [cm]. Les potentiels électriques sont en millivolt [mV]. Le paramètre $C_m \varepsilon$ est une constante de temps qui mesure la vitesse relative des dynamiques des variables V_m et w . La variable w est sans dimension. Les grandeurs types pour ce modèle sont données dans le tableau 1.1.

Ces équations se simplifient en normalisant V de la manière suivante

$$u = \frac{V - V_r}{V_a - V_r}, \quad a = \frac{V_s - V_r}{V_a - V_r}, \quad k = (V_a - V_r)^2 K, \quad \epsilon = \varepsilon C_m, \quad d = \frac{1}{A_m \varepsilon^2 C_m^2}, \quad (1.26)$$

pour devenir

$$\epsilon \partial_t u = \epsilon^2 \operatorname{div}(dG \nabla u) - ku(u - a)(u - 1) - uw, \quad (1.27)$$

$$\partial_t w = ku(1 + a - u) - w. \quad (1.28)$$

Les échelles de temps et d'espace n'ont pas changé ([s] et [cm]), mais on peut maintenant étudier la solution (u, v) par des arguments de perturbation singulière en supposant que $\epsilon \ll 1$ (voir la section suivante). Les grandeurs correspondantes à celles du tableau 1.1 sont données dans le tableau 1.2.

Avec M. Sermesant, nous avons implémenté une discrétisation par éléments finis $P1$ conforme sur des tétraédrisations d'un domaine de calcul 3D, avec condensation de la matrice de masse (formule de quadrature d'ordre 1) et un schéma en temps explicite en temps :

$$u^{n+1} = u^n - \epsilon \Delta t A u^n + \frac{\Delta t}{\epsilon} f(u^n, w^n),$$

$$w^{n+1} = w^n + g(u^n, w^n),$$

où $A = M^{-1}K$ (M et K sont des matrices de masse et de raideur) et

$$f(u, w) = -ku(u - a)(u - 1) - uw, \quad g(u, w) = ku(1 + a - u) - w. \quad (1.29)$$

⁴Variation de la durée du potentiel d'action (APD) avec la fréquence de stimulation

Sur des maillages grossiers, comme ceux utilisés en imagerie médicale, la contrainte sur le pas de temps est essentiellement liée à l'échelle de temps des phénomènes ioniques, ce qui explique le choix d'une méthode explicite, qui garantit un calcul simple et efficace de la propagation du potentiel d'action [23, 14, 13]. Sur des maillages suffisamment fins, la contrainte de discrétisation du terme de diffusion peut devenir prépondérante. Nous avons donc implémenté le schéma de Cranck-Nicholson avec un schéma d'ordre au moins 2 sur les termes de réaction (méthode de Heun et méthode de Runge-Kutta 4) [34, 98, 12, 24].

Pour l'imagerie médicale

Ces schémas ont d'abord été appliqués à la simulation d'un unique battement cardiaque ventriculaire (dépolariation et repolarisation, ventricules gauche et droit) [12, 24, 23, 14, 13]. L'objectif principal de ce travail était de montrer la possibilité d'utiliser un modèle physiologique comme support à des procédés d'imagerie médicale. En effet, les mesures et images pour le coeur sont trop éparées pour avoir une description précise de son fonctionnement, d'où l'idée de coupler les informations du modèle avec celles des images et mesures, comme décrit dans [24]. Il s'agissait d'un sujet d'étude des projets ICEMA et ICEMA-2.

Les travaux [14, 13] montrent les premiers résultats calculés sur les modèles expérimentaux de l'université de Auckland⁵, obtenus par dissection d'un coeur de chien et décrivant de manière éparse mais précise les fibres musculaires. Les données (256 points de mesure) ont été interpolées pour obtenir des maillages assez fins des ventricules. D'autres géométries issues d'images médicales (IRM et CT) ont été utilisées. La difficulté principale est de construire le champ du vecteur des directions des fibres musculaires. Pour cela, 3 méthodes ont été utilisées [98],

- les données de dissection obtenues à l'Université de Auckland,
- une extrapolation par interpolation tricubique spécifique des données de Auckland, réalisée à l'Université de Californie, San Diego (UCSD),
- des données récentes obtenues par (*Diffusion Tensor Imaging*) (DTI), un procédé de type IRM permettant de visualiser de manière grossière les fibres musculaires.

Les mesures par DTI sont encore trop imprécises, et l'obtention d'une carte des fibres musculaires sur géométrie 3D reste une difficulté fondamentale de la modélisation du myocarde.

Ces résultats, couplés à un modèle de comportement mécanique simplifié ont permis à M. Sermesant d'obtenir une partie des résultats de sa thèse [98].

Les résultats ont été partiellement validés de plusieurs manières. D'abord les isochrones (isolignes des temps d'activation du myocarde) obtenues numériquement ont été comparées qualitativement à celles obtenues expérimentalement sur un coeur isolé [61]. Ensuite, le modèle a été comparé à une série d'expériences réalisées au NIH sur un coeur isolé stimulé en un point par une électrode artificielle [12, 23]. Ces comparaisons assez précises montrent en particulier que les mesures de fibres par DTI ne permettent pas de construire un modèle physiologiquement convenable, au contraire des distributions de fibres extrapolées à partir des mesures de l'Université de Auckland.

⁵www.esc.auckland.ac.nz/index.asp

En bioingénierie

En collaboration avec M. Pop⁶, des résultats complémentaires ont été obtenus. Il s'agissait d'expliquer un phénomène de réentrées, connu et identifié expérimentalement, dans le modèle numérique approchant les solutions des équations monodomaines

La région de tissus lésée par un infarctus du myocarde est souvent la réunion de 2 demi-disques (inactifs) séparés par un canal encore actif. Dans ce cas, on voit apparaître des *ondes spirales* autour de la zone ischémiée, dans certaines circonstances. Ces ondes sont observées expérimentalement sur l'épicarde à l'aide d'un procédé de vidoluminescence en lumière polarisée. Les simulations numériques ont été conformes aux expériences. Elles ont permis d'identifier la fréquence cardiaque comme une cause essentielle de ces réentrées [19, 18], et de valider la chirurgie réparatrice basée sur un procédé d'ablation radiofréquence [20, 18].

1.2.2 Analyse et analyse numérique de la méthode des volumes finis

Le premier travail de la thèse de C. Pierre a été de compléter et de préciser l'étude expérimentale, numérique. Nous avons

- réalisé l'analyse, par développement asymptotique ($\epsilon \ll 1$), du potentiel d'action décrit par le modèle de Aliev-Panfilov [37], vitesse de propagation et durée du potentiel d'action en fonction des paramètres $0 < a < 1$ et $k > 0$,
- démontré un résultat de convergence sous des conditions de stabilité sur le pas de temps pour une méthode volumes finis,
- réalisé une étude numérique complète en 1D pour comprendre les contraintes pratiques de discrétisation (convergence en maillages, ...).

Étude des équations monodomaines

Les outils de l'analyse du système monodomaine (1.20), (1.21) avec un modèle ionique (1.1)-(1.3) sont un théorème de point fixe de Banach et des bornes a priori sur la solution du problème, voir par exemple [101]. Il s'agit en effet d'un système de réaction diffusion que l'on peut mettre sous la forme suivante

$$\partial_t u = Au + F(u), \quad (1.30)$$

où l'inconnue est

$$u : (t, x) \in (0, +\infty) \times H \mapsto u(t, x) = (u_0, u_1, \dots, u_m) \mathbb{R}^{m+1}$$

avec $m > 0$ le nombre d'équations du modèle ionique, u_0 est le potentiel de membrane et $w = (u_1, \dots, u_m)$ sont les variables du modèle de membrane. On a

$$Au = \begin{pmatrix} \operatorname{div}(G(x)\nabla u_0) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

⁶PhD student, Dep. of Medical Biophysics, University of Toronto

et la fonction $F : \mathbb{R}^{m+1} \rightarrow \mathbb{R}^{m+1}$ décrit le modèle de membrane choisi. Nous avons étudié en particulier le modèle de Aliev-Panfilov [37] décrit ci-dessus (équations (1.27)-(1.28)), pour lequel $m = 1$ et

$$F^{(AP)}(u) = \begin{pmatrix} -ku_0(u_0 - a)(u_0 - 1) - u_0u_1 \\ ku_0(1 + a - u_0) - u_1 \end{pmatrix}$$

et le modèle plus connu de FitzHugh-Nagumo, pour lequel $m = 1$ et

$$F^{(FHN)}(u) = \begin{pmatrix} -u_0(u_0 - a)(u_0 - 1) - u_1 \\ ku_0 - u_1 \end{pmatrix}.$$

La matrice de diffusion $G(x)$ est symétrique, de la forme

$$G(x) = R(x) \begin{pmatrix} g^{(1)}(x) & & \\ & g^{(2)}(x) & \\ & & g^{(3)}(x) \end{pmatrix} R(x)^T$$

où $R(x)$ est la matrice de passage associée à la base de Freinet de la fibre musculaire et $0 < \underline{g} \leq g^{(i)}(x) \leq \bar{g}$ pour presque tout $x \in H$. Comme les fibres sont tangentes au bord, on a $G\nabla u_0 \cdot \mathbf{n}_\Sigma = g^{(1)}(\nabla u_0 \cdot \mathbf{n}_\Sigma)$ sur le bord Σ , et la condition au bord se réécrit

$$\nabla u_0(x) \cdot \mathbf{n}_\Sigma = 0 \quad \text{sur } \Sigma. \quad (1.31)$$

Pour une donnée initiale $u^{(0)}$, on prend aussi

$$u(x, 0) = u^{(0)}(x), \quad \text{p.p. } x \in H. \quad (1.32)$$

Pour $u^{(0)} \in H^2(H) \times L^\infty(H)$ vérifiant (1.31), le problème de Cauchy (1.30), (1.31), (1.32) a une solution unique u pour $t \in [0, T)$ avec $T > 0$, en supposant que F est localement Lipschitzienne et sous des hypothèse de régularité classiques (la frontière de H est C^2 et les coefficients de $G(x)$ sont des fonctions $C^1(\bar{H})$). En général la solution est continue de $[0, T)$ dans $L^2(H) \times L^\infty(H)$ et Frchet différentiable sur $(0, T)$; et pour chaque $t \in (0, T)$, $u_0(t) \in H^2(H)$, et $F(u(t)) \in L^2(H) \times L^\infty(H)$, voir [4] pour les détails.

Théorème 1.1 *La solution u définie ci-dessus existe pour tout temps $t > 0$ ($T = +\infty$) car on peut trouver des régions invariantes simples pour F (figure 1.5) et démontrer un principe du maximum fort pour l'opérateur $A : \operatorname{div}(G\nabla u(x_0)) \leq 0$ si $u \in C^2(\bar{H})$ a un maximum en $x_0 \in \bar{H}$.*

En effet, dans ce cas, les régions invariantes pour F de la figure 1.5 sont aussi des régions invariantes pour les solutions de (1.30), c'est à dire que

$$\forall x \in \bar{H}, u^{(0)}(x) \in \operatorname{int}(\Sigma) \Rightarrow \forall t > 0, \forall x \in \bar{H}, u(t) \in \operatorname{int}(\Sigma).$$

Ainsi la solution u de (1.30), (1.31), (1.32) est définie pour tout $t > 0$ et uniformément bornée dans L^∞ en temps.

Chacun de ces deux modèles (FitzHugh-Nagumo et Aliev-Panfilov) possède des solution « onde progressive », de la forme $u(x, t) = U(x - ct)$ qui peuvent être étudiées par une technique de développement asymptotique en $\epsilon = 0$ [47]. On montre que la solution est donnée par deux fronts, la dépolarisation et la repolarisation des cellules, dont la vitesse est celle d'une équation bistable. On peut donc calculer explicitement les valeurs

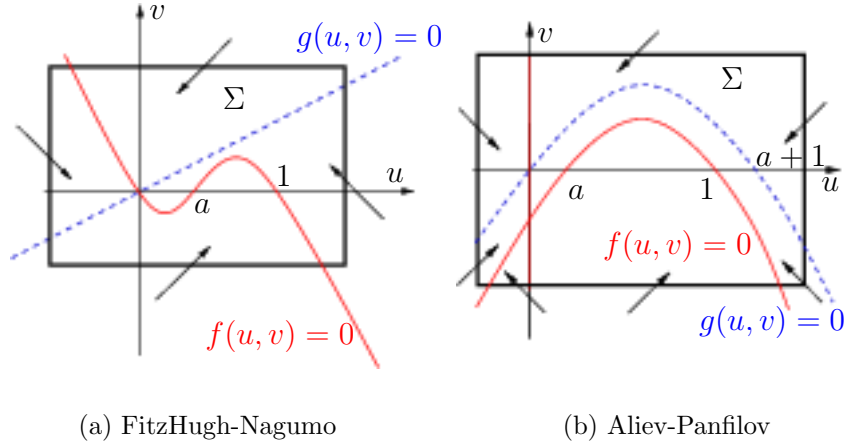


FIG. 1.5 – Régions invariantes

asymptotiques en $\epsilon = 0$ de la vitesse de propagation d'une onde plane, et de la durée du potentiel d'action (distance entre les deux fronts), voir par exemple la thèse de C. Pierre [94] et [47].

Le modèle de FitzHugh-Nagumo est adapté à la simulation d'un potentiel d'action neuronal, on s'intéresse donc plus particulièrement au modèle de Aliev-Panfilov, adapté aux cardiomyocytes. Pour celui-ci, on trouve très simplement

$$c_{\epsilon=0} \sqrt{\frac{d g k}{2}} (1 - 2a), \quad APD_{\epsilon=0} \sim \frac{1}{a} \left(\frac{1 - a}{2} \right)^2. \quad (1.33)$$

Les paramètres d, g sont des paramètres physiologiques donnés par ailleurs.

Remarque 1.1 *Un des intérêt du modèle de Aliev-Panfilov ci-dessus est que l'on relie très simplement les paramètres « vitesse de front » et « durée du potentiel d'action » avec les coefficients a et k des équations.*

Analyse numérique

Nous avons utilisé la méthode de volumes finis décrite dans [65] sur des *maillages admissibles*. En effet,

- on peut adapter, comme indiqué dans [65], la condition d'admissibilité à la conductivité anisotrope $G(x)$ de l'équation monodomaine ;
- la matrice de discrétisation de l'opérateur $-\operatorname{div}(dG(x)\nabla \cdot)$ est alors une M-matrice.

Un maillage G -admissible est un découpage de H en volumes de contrôle polyédraux K dont les faces sont notées σ et telle que l'on peut trouver des points x_K et x_σ dans K et σ vérifiant : $x_\sigma - x_K$ est colinéaire à $G_K \mathbf{n}_\sigma$, avec $G_K = \frac{1}{|K|} \int_K G$ et \mathbf{n}_σ une normale unitaire à σ . Sur un maillage en triangles ou tétraèdres, il suffit de prendre les centres de gravité des faces pour les x_σ et les centres de cercles ou sphères circonscrites aux volumes de contrôle pour les x_K . Plus généralement, les maillages de Voronoï conviennent.

Sur un maillage G -admissible de N volumes de contrôle, on note A la matrice de discrétisation de $-\operatorname{div}(dG\nabla u)$. Le problème (1.27)-(1.28) semi-discrétisé en espace s'écrit

$$\epsilon \frac{dU}{dt}(t) = \epsilon^2 A U + F(U, V), \quad (1.34)$$

$$\frac{dV}{dt}(t) = F(U, V) \quad (1.35)$$

pour les inconnues vectorielles $U, V : t \in \mathbb{R}^+ \mapsto U(t), V(t) \in \mathbb{R}^N$ approchant la solution $u(t, x), v(x, t)$ en moyenne dans chaque volume de contrôle K , et la notation $F(U, V) = (f(u_1, v_1), \dots, f(u_N, v_N))$ et $G(U, V) = (g(u_1, v_1), \dots, g(u_N, v_N))$, où f et g sont données par (1.29).

Puisque A est une M-matrice, on voit que $\{AU\}_i \leq 0$ si u_i est le maximum de $U = (u_1, \dots, u_N)$, ce qui est l'analogie de la propriété de principe de maximum fort énoncée dans le thm 1.1 ci-dessus. On peut donc démontrer qu'une région Σ du plan (u, v) invariante pour les solution de l'EDP est encore une région invariante pour les solutions $U(t), V(t)$ du système différentiel (1.34)-(1.35).

On peut ensuite montrer que Σ est encore une région invariante pour les solutions discrètes données par les deux méthodes décrites ci-dessous (Euler explicite et Euler implicite), sous une condition de pas de temps.

méthode 1 : Euler complètement explicite

$$\varepsilon \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} = \varepsilon^2 AU^n + F(U^n, V^n), \quad (1.36)$$

$$\frac{V^{n+1} - V^n}{\Delta t} = G(U^n, V^n). \quad (1.37)$$

méthode 2 : le terme de diffusion est discrétisé implicitement

$$\varepsilon \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} = \varepsilon^2 AU^{n+1} + F(U^n, V^n), \quad (1.38)$$

$$\frac{V^{n+1} - V^n}{\Delta t} = G(U^n, V^n). \quad (1.39)$$

Théorème 1.2 Soit $\Sigma \subset \mathbb{R}^2$ un domaine invariant rectangulaire (figure 1.5). Alors le système (1.34)-(1.35) à une solution unique $U(t), V(t)$ pour $t > 0$ telle que

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}, (u_i^0, v_i^0) \in \Sigma \Rightarrow \forall t > 0, \forall i \in \{1, \dots, N\}, (u_i(t), v_i(t)) \in \Sigma.$$

Preuve. La preuve est classique, puisque A est une M-matrix, voir [4]. ■

Théorème 1.3 (Condition de pas de temps générale) Soit $\Sigma \subset \mathbb{R}^2$ un domaine invariant rectangulaire (figure 1.5). Alors la solution $(U^n, V^n)_{n \geq 0}$ de (1.36)-(1.37) ou bien de (1.38)-(1.39) est bien définie et telle que

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}, (u_i^0, v_i^0) \in \Sigma \Rightarrow \forall n \in \mathbb{N}, \forall i \in \{1, \dots, N\}, (u_i^n, v_i^n) \in \Sigma,$$

sous la condition de stabilité

– pour la **méthode 1**,

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad C_i \Delta t \frac{\varepsilon}{|K_i|} + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left| \inf_{\Sigma} \partial_u f \right| \leq 1, \quad \Delta t \left| \min_{\Sigma} \partial_v g \right| \leq 1, \quad (1.40)$$

– et pour la **méthode 2**,

$$\frac{\Delta t}{\varepsilon} \left| \min_{\Sigma} \partial_u f \right| \leq 1, \quad \Delta t \left| \min_{\Sigma} \partial_v g \right| \leq 1, \quad (1.41)$$

où $C_i = \sum_{\sigma \in \delta K^*} \tau_{\sigma}^7$ ne dépend pas de la taille du maillage.

⁷ δK^* son les faces de K_i et τ_{σ} est une moyenne harmonique des conductivités dans la direction \mathbf{n}_{σ}

Le plus petit rectangle invariant Σ pour le système de Aliev-Panfilov est donné par

$$\Sigma_c = [0, 1] \times [0, v_c] \quad \text{ou} \quad v_c = k \left(\frac{1+a}{2} \right)^2.$$

Comme $\partial_u f(u, v) = -k(3u^2 - 2(1+a)u + a) - v$ et $\partial_v g(u, v) = -1$, on a

$$\forall a \in [0, 1/2], \quad \left| \min_{\Sigma_c} \partial_u f \right| = \frac{k}{4}(a^2 - 2a + 5) \leq \frac{5}{4}k, \quad \left| \min_{\Sigma_c} \partial_v g \right| = 1,$$

Théorème 1.4 (Condition simplifiée pour le modèles de Aliev-Panfilov) *Si $a \in [0, 1/2]$ et si $(U^0, V^0) \in \Sigma_c$ alors la solution approchée (U^n, V^n) est bien définie pour tout $n \in \mathbb{N}$ et telle que $(U^n, V^n) \in \Sigma_c$ sous la condition*

– pour la **méthode 1**,

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad \max \left(1, \left(\frac{C_i \varepsilon}{|K_i|} + \frac{5k}{4\varepsilon} \right) \right) \Delta t \leq 1,$$

– et pour la **méthode 2**,

$$\max \left(1, \frac{5k}{4\varepsilon} \right) \Delta t \leq 1.$$

Notons que $\frac{C_i}{|K_i|} = O(h^{-2})$ asymptotiquement en $h = 0$, et on voit apparaître la compétition usuelle entre le pas de temps imposé par le schéma explicite sur l'opérateur de diffusion, en $\Delta t = O(\epsilon^{-1}h^2)$, et le pas de temps imposé par la discrétisation explicite du terme réactif, $\Delta t = O(\epsilon)$.

Expériences et difficultés numériques

Les difficultés pratiques du calcul des solutions approchées des équations monodomaines (1.27)-(1.28), avec conditions de bord (1.21) et donnée initiale (1.32) ont été étudiées, et les résultats sont disponibles dans la thèse de C. Pierre [94] et ont été partiellement exposés à l'occasion d'une école de printemps INRIA en 2004, [34].

Le phénomène de *propagation failure* est la première limitation : l'équation (1.27)-(1.28) possède des solutions « ondes progressives », alors que le système semi-discret (1.34)-(1.35)

- n'en possède plus dès que le d'espace h est trop grand $h > h^*$ [81]
- en possède pour h assez petit, $h < h_*$ [111].

Il est important de noter que la condition $h < h_*$ dépend des paramètres d , G , et ϵ ,

$$h_* = \alpha \sqrt{d|G|\epsilon},$$

où α est une constante. En pratique, ce phénomène est rarement limitant puisque la normalisation (1.26) des équations donne $d|G|\epsilon = \frac{|G|}{A_m \varepsilon C_m}$.

Nous avons ensuite tenté de valider l'approximation par volumes finis des équations monodomaines. L'objectif était

- de reproduire les ondes progressives attendues ;
- d'observer des ondes spirales en 2D et 3D ;
- d'observer la convergence de la solution discrète pour $\Delta x \rightarrow 0$;
- concernant la vitesse des ondes et la durée du potentiel d'action (APD),

- d’observer la convergence avec Δx ,
- de retrouver la dépendance vis à vis des paramètres.

On peut penser que le schéma explicite est moins intéressant que le schéma semi-implicite, puisqu’il requiert beaucoup plus de pas de temps. Mais il faut regarder la précision obtenue sur la solution pour conclure de manière plus pertinente (solution, vitesse et APD).

L’APD à été mesurée en x comme la différence entre les instants $t_1(x)$ et $t_2(x)$ d’activation (u devient strictement positif) et de repolarisation ($u = 0.1$ dans le cas d’un potentiel normalisé). On observe en 1D que les dérivées par rapport à x , $\frac{d}{dx}t_1(x) = \frac{d}{dx}t_2(x) = 1/c$ donnent la vitesse de propagation, alors que $t_2(x) - t_1(x) = APD$ est la durée du potentiel d’action. Ces deux nombres sont constants dans les 80% centraux du domaine de calcul 1D, $0 \leq x \leq 10$. Nous avons testé les schémas explicites et implicites cités ci-dessus et le schéma semi implicite de Cranck-Nicholson, à chaque fois en respectant la condition de pas de temps théorique.

La convergence en maillage est assez tardive, et dans tous les cas, c’est le schéma explicite en temps qui donne les meilleurs résultats sur la vitesse et l’APD. Le schéma explicite est le plus rentable en terme de rapport précision - coût, dans les situations 1D étudiées ici.

Ces résultats devraient être complétés par une étude similaire en 2D et 3D pour estimer si le schéma complètement explicite, bien que convergent plus rapidement sur la vitesse et l’APD est encore le plus rentable : il faut estimer le coût (temps de calcul) à précision donnée.

1.3 Les équations bidomaines

Il est admis depuis la fin des années 1990 [54] que l’utilisation du modèle bidomaine est indispensable pour rendre compte précisément de la dynamique du potentiel d’action cardiaque (voir aussi [72]). Par ailleurs, c’est le seul modèle qui couple complètement le fonctionnement électrique du coeur, source électrique, avec le milieu environnement, le thorax.

Nous étudions le système bidomaine couplé sous la forme donnée par les équations (1.15), (1.16) dans le coeur H et (1.12) dans le thorax, avec les conditions d’interface (1.13) sur Σ (figure 1.4) et les conditions de bord (1.14). Le courant ionique de membrane peut être donné par un modèle ionique réaliste (1.1)-(1.3) ou bien par un modèle simplifié comme le modèle de Aliev-Panfilov (1.23)-(1.24). Nous étudions ces équations sous la forme simplifiée :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + f(u, w) - \operatorname{div}(G_i \nabla u) - \operatorname{div}(G_i \nabla u_e) = s_i, \quad \text{in } (0, +\infty) \times H, \quad (1.42)$$

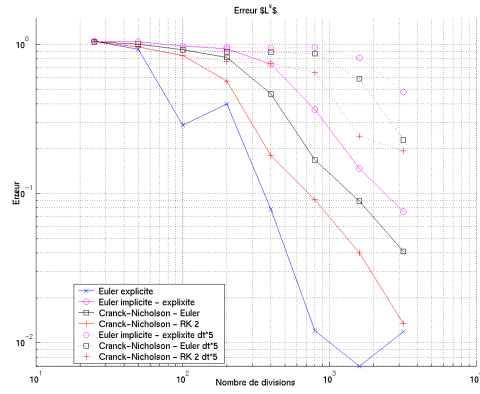
$$\operatorname{div}(G_i \nabla u + (G_i + G_e) \nabla u_e) = -(s_i + s_e), \quad \text{in } (0, +\infty) \times H, \quad (1.43)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + g(u, w) = 0, \quad \text{in } (0, +\infty) \times H, \quad (1.44)$$

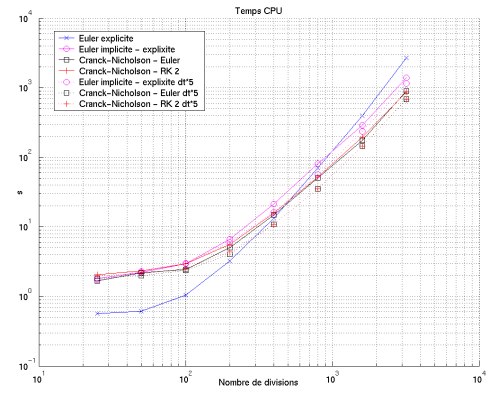
$$G_i \nabla u \cdot \mathbf{n} + G_i \nabla u_e \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{in } (0, +\infty) \times \Sigma, \quad (1.45)$$

$$G_i \nabla u \cdot \mathbf{n} + (G_i + G_e) \nabla u_e \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{in } (0, +\infty) \times \Sigma, \quad (1.46)$$

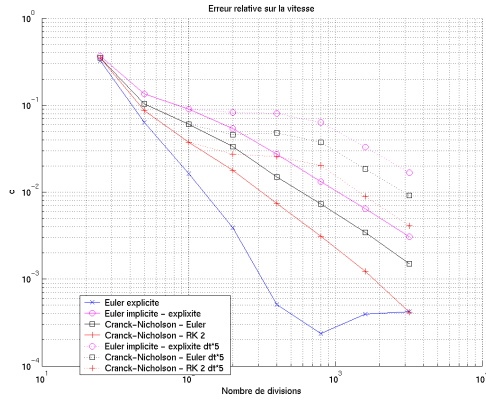
$$u(0) = u_0, \quad w(0) = w_0, \quad \text{in } H. \quad (1.47)$$



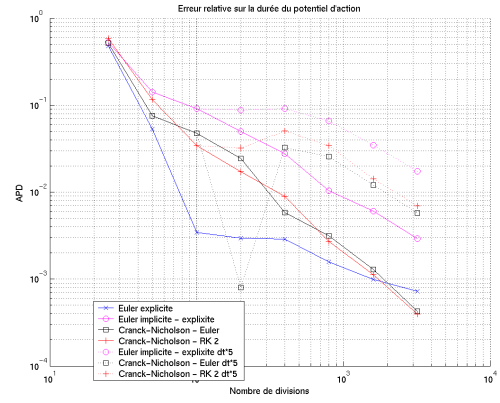
(a) Erreur L^∞



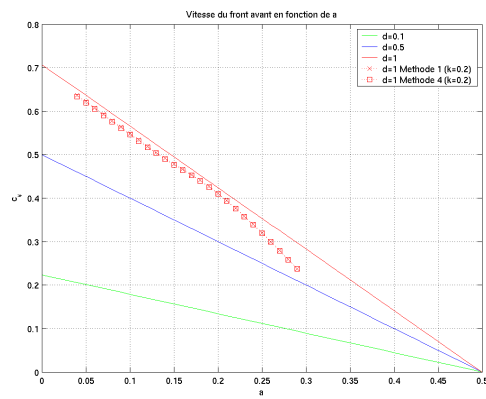
(b) Temps CPU



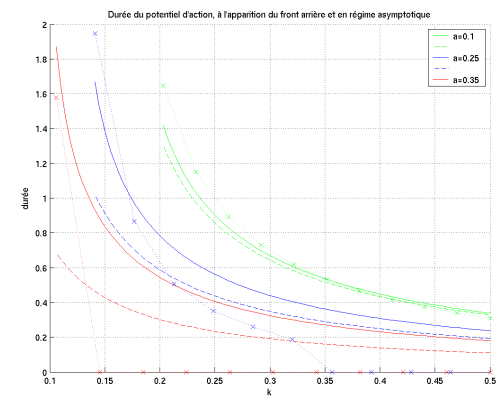
(c) Convergence de la vitesse



(d) Convergence de l'APD



(e) Abaques des vitesses



(f) Abaque des APD

FIG. 1.6 – Erreurs

1.3.1 Existence et unicité des solutions pour le modèle de coeur isolé

Dans ce cas, le système d'équations n'a plus la forme (1.30) et son étude est plus délicate. Le premier résultat d'existence de solution est dû à P. Colli-Franzone et P. Savare [57]. Un résultat plus récent de M. Veneroni généralise celui-ci [106]. Ces résultats sont basés sur la formulation du système comme un système parabolique dégénéré (1.7)-(1.8). L'approche de [57], basée sur une théorie abstraite des inégalités variationnelles d'évolution, n'est valable que pour des modèles ioniques très particuliers, en pratique le modèle de FitzHugh-Nagumo. L'analyse présentée dans [106] permet de traiter le cas des modèles ioniques réalistes ayant la forme du modèle de Luo-Rudy 1 [86]. Néanmoins, aucune de ces approches ne s'applique aux modèles simplifiés utiles pour le calcul du potentiel d'action cardiaque, comme le modèle de Aliev-Panfilov [37] ou celui de R. MacCulloch [96]. Plus récemment et pour ces modèles simplifiés, d'autres auteurs ont proposé des preuves d'existence utilisant la formulation variationnelle [43] ou une approche récente des systèmes paraboliques dégénérés [40].

Dans [3], nous proposons d'utiliser la formulation parabolique-elliptique (1.42)-(1.47) pour démontrer un nouveau résultat d'existence et unicité des solutions des équations bidomaines. Nous n'avons développé cette approche que dans le cas du modèle de coeur isolé. L'idée est d'intégrer l'équation elliptique (1.43) et de remplacer u_e dans (1.42) par son expression. Le système bidomaine a alors la forme

$$\frac{\partial u}{\partial t} + f(u, w) + Au = s, \quad (1.48)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + g(u, w) = 0, \quad (1.49)$$

$$u(0) = u_0, \quad w(0) = w_0, \quad (1.50)$$

où f et g sont toujours les fonctions du modèle ionique, par exemple (1.29), u est le potentiel de membrane et $w \in \mathbb{R}^m$ l'ensemble des variables du modèle ionique. L'opérateur bidomaine A et le terme source s (issu des courants de stimulation $I_{stim,i}$ et $I_{stim,e}$) s'écrivent formellement

$$Au = ((\operatorname{div}(G_i \nabla)^{-1} + (\operatorname{div}(G_e \nabla)^{-1}))^{-1} u, \quad (1.51)$$

et

$$s = s_i - \operatorname{div}(G_i \nabla (\{\operatorname{div}(G_i + G_e) \nabla\}^{-1} (s_i + s_e))) \quad (1.52)$$

$$= -s_e + \operatorname{div}(G_e \nabla (\{\operatorname{div}(G_i + G_e) \nabla\}^{-1} (s_i + s_e))), \quad (1.53)$$

et on peut retrouver u_i, u_e , à une constante près avec

$$u_i = u + u_e, \quad u_e = \{\operatorname{div}(G_i + G_e) \nabla\}^{-1} (-(s_i + s_e) - \operatorname{div} G_i \nabla u) \quad (1.54)$$

ou bien

$$u_e = u_i - u, \quad u_i = \{\operatorname{div}(G_i + G_e) \nabla\}^{-1} ((s_i + s_e) + \operatorname{div} G_e \nabla u). \quad (1.55)$$

L'opérateur bidomaine A est la moyenne harmonique de 2 opérateurs différentiels d'ordre 2, qui est à comparer avec la formulation (1.22) de l'opérateur monodomaine, dans lequel la diffusion est la moyenne harmonique des diffusions intra et extracellulaires.

L'opérateur bidomaine est encore symétrique, elliptique et d'ordre deux, mais c'est un opérateur intégrodifférentiel. On ne sait pas s'il possède encore le principe du maximum fort de $-\operatorname{div}(G(x)\nabla\cdot)$, et l'approche développée pour le monodomaine n'est plus valable. La difficulté est reportée sur l'étude de l'opérateur A .

Remarque 1.2 *Sous la forme (1.7)-(1.8), le système présente une symétrie : il suffit d'échanger ϕ_i avec ϕ_e , et G_i avec G_e dans (1.7) pour retrouver (1.8). Cette symétrie n'est pas rompue dans la formulation (1.48), comme on peut le voir dans les équations (1.51) (symétrie de A), (1.52)-(1.53) (symétrie du calcul de s) et (1.54)-(1.55) (évaluation des $u_{i,e}$), même si l'on peut choisir une des deux formulations (1.54) et (1.55) pour calculer les potentiels intra et extracellulaire. On peut aussi choisir de les calculer en utilisant (1.54) pour u_e et (1.55) pour u_i .*

On peut donner un sens à l'opérateur et au terme source bidomaine grâce aux conditions aux limites (1.45)-(1.46), à la propriété 1.1 des matrices de conductivité, et à l'hypothèse $\int_H (s_i + s_e) = 0$. Deux écritures rigoureuses des équations (1.51)-(1.55) sont présentées dans [3] : une formulation forte et une formulation faible.

Solutions fortes, locales en temps

Définition 1.1 *Une solution forte (définition 18 de [3]) est un triplet (u, u_e, w) de fonction de $[0, T)$ dans H^2 , H^2/\mathbb{R} , L^∞ vérifiant (1.42)-(1.44) pour tout $t \in [0, T)$ et presque tout $x \in H$, et (1.45)-(1.46) pour tout $t \in [0, T)$ et presque tout $x \in \Sigma$.*

On obtient la formulation forte de l'opérateur bidomaine en utilisant l'espace

$$D(A) = \{u \in H^2(H), \nabla u \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ p.p. dans } H\},$$

puisque d'après la propriété 1.1, les conditions de bord sont toutes équivalentes à la condition de Neumann homogène $\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0$. On peut donc définir les 3 opérateurs suivants sur le domaine $D(A)/\mathbb{R}$,

$$A_i u = -\operatorname{div}(G_i \nabla u), \quad A_e u = -\operatorname{div}(G_e \nabla u), \quad (A_i + A_e)u = -\operatorname{div}((G_i + G_e) \nabla u). \quad (1.56)$$

Ils sont évidemment à domaine dense, autoadjoints, maximaux monotone et d'inverses compacts. Étant donnés $s_{i,e} \in L^2(H)$ tel que $\int_H (s_i + s_e) = 0$, on peut définir rigoureusement l'opérateur et le terme source bidomaine,

$$Au = A_i(A_i + A_e)^{-1}A_e[u], \quad \forall u \in D(A), \quad (1.57)$$

$$s = s_i - A_i(A_i + A_e)^{-1}(s_i + s_e) = -s_e + A_e(A_i + A_e)^{-1}(s_i + s_e), \quad (1.58)$$

où $[u] = u - \int_H u \in D(A)/\mathbb{R}$ pour $u \in D(A)$ ⁸.

Puisque l'opérateur bidomaine est encore un opérateur autoadjoint et maximal monotone, on peut obtenir un résultat d'existence local en temps en utilisant la théorie standard des semi-groupes et des équations paraboliques semilinéaires, voir par exemple [75].

Considérons $Z = L^2(H) \times B^m$ où $B = L^\infty(H)$ (cas (a)) ou bien $B = C^\nu(\bar{H})$ (cas (b)), $0 < \nu < 1$, et l'opérateur $\mathcal{A} : (u, v) \in D(A) \times B^m \subset Z \mapsto (Au, 0) \in Z$. On peut définir les interpolés \mathcal{A}^α pour $0 \geq \alpha$ et leur domaines Z^α . Alors on peut montrer que

⁸en ayant choisi la représentation de l'espace quotient par l'espace des fonctions à moyenne nulle. Sinon, $[u]$ est la classe de u dans $D(A)/\mathbb{R}$.

- dans le cas (a), si f et g sont localement Lipschitziennes sur $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^m$ alors pour $d/4 < \alpha < 1$, on a $Z^\alpha \subset L^\infty(H) \times B^m$ et l'application $(u, v) \in Z^\alpha \mapsto (f(u, v), g(u, v)) \in Z$ est bien définie et localement Lipschitzienne,
- dans le cas (b), si f et g sont $C^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^m)$ alors pour $0 < \nu < 2\alpha - d/2$, on a $Z^\alpha \subset C^\nu(\bar{H}) \times B^m$ et l'application $(u, v) \in Z^\alpha \mapsto (f(u, v), g(u, v)) \in Z$ est bien définie et localement Lipschitzienne.

Théorème 1.5 (Existence unicité en temps fini) *Pour $0 < \alpha < 1$ défini comme ci-dessus, si s_i, s_e sont $C_{loc}^\nu(\mathbb{R}^+; L^2(H))$ et si $(u_0, w_0) \in Z^\alpha$ alors il existe $T > 0$ tel que (1.42)-(1.47) a une unique solution forte, $(u(t), w(t)) \in H^2(H) \times B^m \subset Z^\alpha$ continue de $[0, T)$ dans Z , différentiable de $(0, T)$ dans Z , et tel que $t \mapsto (f(u, v), g(u, v)) \in Z$ est C^ν sur $(0, T)$ et continue en 0.*

On retrouve alors $u_e(t) \in D(A)/\mathbb{R}$ avec $u_e(t) = (A_i + A_e)^{-1}((s_i(t) + s_e(t)) - A_i[u(t)])$.

Les solutions sont définies dans l'espace d'interpolation noté Z^α , et la donnée initiales est contrainte dans Z^α avec $\alpha > d/4$ dans le cas le plus simple.

Théorème 1.6 (Régularité) *Si de plus les données sont régulières, $G_{i,e} \in C^{1+\nu}(\bar{H})$, $\Sigma = \partial H$ est $C^{2+\nu}$, $s_i(t), s_e(t) \in C^\nu(\bar{H})$ pour tout $t \geq 0$, alors la solution est C^1 en temps et C^2 en espace.*

Solutions faibles, pour tout temps

Définition 1.2 *Un triplet (u, u_e, w) (définition 26 de [3]) de fonctions de $[0, T)$ à valeurs dans $H^1(H) \times H^1(H)/\mathbb{R} \times L^2(H)$ est une solution faible si*

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(u(t), v) + \int_H G_i \nabla(u(t) + u_e(t)) \cdot \nabla v + \int_H f(u(t), w(t))v &= \int_H s_i(t)v \\ \frac{d}{dt}(w(t), v) + \int_H g(u(t), w(t))v &= 0 \end{aligned}$$

respectivement pour toutes fonctions tests $v \in H^1(H)$ et $v \in L^2(H)$, avec pour presque tout t ,

$$\int_H G_i \nabla u(t) \cdot \nabla v_e + \int_H (G_i + G_e) \nabla u_e(t) \cdot \nabla v_e = \int_H (s_i(t) + s_e(t))v_e$$

pour tout $v_e \in H^1(H)/\mathbb{R}$.

On peut obtenir et étudier la forme faible de l'opérateur bidomaine en sommant les équations en u et u_e ci-dessus :

$$\frac{d}{dt}(u(t), v) + b((u(t), u_e(t)), (v, v_e)) + \int_H v f(u(t), w(t)) = \int_H s_i(t)v + \int_H (s_i(t) + s_e(t))v_e,$$

avec, après simplification

$$b((u, u_e), (v, v_e)) = a_i(u + u_e, v + v_e) + a_e(u_e, v_e), \quad (1.59)$$

où $a_{i,e}(u, v) = \int_\Omega G_{i,e} \nabla u \cdot \nabla v$; ce qui montre que b est symétrique et uniformément elliptique sur $H^1/\mathbb{R} \times H^1/\mathbb{R}$. On définit alors la forme bilinéaire \bar{a} sur $H^1(H)/\mathbb{R} \times H^1(H)/\mathbb{R}$ par

$$\bar{a}(u, v) = b((u, \tilde{u}_e), (v, 0)), \quad \tilde{u}_e \text{ unique solution de } b((u, \tilde{u}_e), (0, v_e)) = 0, \quad \forall v_e \in H^1/\mathbb{R}.$$

La forme bilinéaire de l'opérateur bidomain est définie par extension à $H^1(H)$,

$$\forall (u, v) \in H^1(H), \quad a(u, v) = \bar{a}([u], [v]).$$

Bien entendu, les formes bilinéaires $a_{i,e}$ et \bar{a} définissent des applications linéaires continues et inversibles $A_{i,e}$ et A de H^1/\mathbb{R} dans son dual $(H^1/\mathbb{R})'$. Ces applications étendent les opérateurs A , $A_{i,e}$ du paragraphe précédent. Pour définir rigoureusement l'opérateur faible A , il faut utiliser l'injection $J : u \in H^1 \mapsto [u] \in H^1/\mathbb{R}$ et sa transposée $J^T : (H^1/\mathbb{R})' \rightarrow (H^1)'$, voir [3].

On peut aussi redéfinir le terme source dans $(H^1)'$ par

$$\langle s, v \rangle = \langle s_i, v_e \rangle - a_i(\bar{u}_e, [v]),$$

$$\bar{u}_e \text{ unique solution de } (a_i + a_e)(\bar{u}_e, v_e) = \langle s_i + s_e, v_e \rangle, \quad \forall v_e \in H^1/\mathbb{R}.$$

Cette fois, les termes source s_i, s_e sont donnés seulement dans $(H^1)'$. Comme $(H^1)' \subset (H^1/\mathbb{R})'$, on a bien $s_i + s_e \in (H^1/\mathbb{R})'$ et l'équation ci-dessus à un sens. Mais réciproquement, pour que la solution faible ait un sens dans $\mathcal{D}'(H)$, il faut supposer que $\langle s_i + s_e, 1 \rangle = 0$ où $1 \in H^1$ est la fonction constante égale à 1. Si s_i, s_e sont donnés par des fonctions L^2 , c'est la condition de moyenne nulle $\int_H (s_i + s_e) = 0$.

Alors une solution faible est classiquement une solution des équations (1.48)-(1.49) dans $(H^1(H))'$ et $L^2(H)$, au sens des distributions sur $(0, T)$. Pour que cela ait un sens, il faut que $f(u, v) \in (H^1)'$ et $g(u, v) \in L^2$ pour tout $(u, v) \in H^1 \times L^2$. C'est pourquoi, nous supposons que $m = 1$ (modèles simplifiés, Aliev-Panfilov, FitzHugh-Nagumo, etc) et que pour un $p \geq 2$,

1. l'injection de Sobolev $H^1 \subset L^p \subset L^2$ a lieu,
2. $f(u, w) = f_1(u) + f_2(u)w$ et $g(u, w) = g_1(u) + g_2w$, avec f_1, f_2, g_1 des fonctions continues sur \mathbb{R} et $g_2 \in \mathbb{R}$ tel que pour tout $u \in \mathbb{R}$,

$$|f_1(u)| \leq c_1 + c_2|u|^{p-1}, \quad |f_2(u)| \leq c_3 + c_4|u|^{p/2-1}, \quad |g_1(u)| \leq c_5 + c_6|u|^{p/2}.$$

Le point 1. permet d'avoir $H^1 \subset L^p \subset L^2 \equiv (L^2)' \subset L^{p'} \subset (H^1)'$ avec l'injection compacte de H^1 dans l'espace pivot L^2 . Le point 2. permet de donner un sens à $f(u, v)$ dans $(H^1)'$ et $g(u, v)$ dans L^2 . On a alors

$$\|f(u, w)\|_{L^{p'}(\Omega)} \leq A_1|\Omega|^{1/p'} + A_2\|u\|_{L^p(\Omega)}^{p/p'} + A_3\|w\|_{L^2}^{2/p'},$$

$$\|g(u, w)\|_{L^2} \leq B_1|\Omega|^{1/2} + B_2\|u\|_{L^p(\Omega)}^{p/2} + B_3\|w\|_{L^2},$$

pour tout $(u, v) \in H^1 \times L^2$, où les A_i, B_i dépendent des c_i et de g_2 .

Enfin grâce à l'hypothèse supplémentaire

3. il existe $a, \lambda > 0$ et $b, c \geq 0$ tel que

$$\lambda u f(u, w) + w g(u, w) \geq a|u|^p - b(\lambda|u|^2 + |w|^2) - c.$$

on voit qu'une solution faible vérifie l'inégalité

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} (\lambda \|u\|_{L^2}^2 + \|w\|_{L^2}^2) + \lambda a(u, u) + a \int_H |u|^p \leq \lambda \langle s, u \rangle + b(\lambda \|u\|_{L^2}^2 + \|w\|_{L^2}^2) + c|H|.$$

d'où des estimations a priori $L^\infty(0, T; L^2)$, $L^2(0, T; H^1)$ et $L^p(0, T; L^p)$ sur u et $L^2(0, T; L^2)$ sur w .

Alors on peut construire une solution faible par la méthode de Faedo-Galerkin. En utilisant la base propre de l'opérateur bidomaine comme base de Galerkin, et les estimations a priori ci-dessus, on obtient aussi des estimations sur $\partial_t u$, d'où la compacité de la suite des u dans $L^2((0, T) \times H)$. La suite des w est seulement faiblement convergente, mais on peut passer à la limite dans les équations grâce à l'hypothèse 2. ci-dessus : les fonctions f et g sont toujours linéaires en w .

Théorème 1.7 (Existence de solutions faibles globales) *On suppose que H a une frontière Lipschitz, les matrices $G_{i,e}$ ont des coefficients L^∞ et $s_{i,e} \in L^2_{loc}(0, +\infty; (H^1)')$ sont tels que $\langle s_i(t) + s_e(t), 1 \rangle = 0$ pour presque tout $t > 0$. Si les fonctions f et g vérifient les hypothèses 1. à 3. ci-dessus alors pour $u_0, w_0 \in L^2$ le système (1.42)-(1.47) a une solution faible (u, u_e, w) avec, pour tout $T > 0$, $u \in C^0([0, T], L^2) \cap L^2(0, T; H^1) \cap L^p(0, T; L^p) \cap$, $w \in C^0([0, T], L^2$, et d'autre part $\partial_t u \in L^2(0, T; (H^1)') + L^{p'}(0, T; L^{p'})$ et $\partial_t w \in L^2(0, T; L^2)$.*

L'unicité des solutions de ce système est encore un problème partiellement ouvert. Dans [3], nous avons proposé une idée permettant de démontrer l'unicité des solutions de certains modèles (mais pas celui de Aliev-Panfilov). Pour $\mu > 0$, définissons

$$F_\mu(z) = \begin{pmatrix} \mu f(u, w) \\ g(u, w) \end{pmatrix}, \quad \forall z = (u, w) \in \mathbb{R}^2.$$

Si (u_1, w_1) et (u_2, w_2) sont deux solutions faibles alors on a

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_1 - u_2\|_H^2 + a(u_1 - u_2, u_1 - u_2) + \int_H (f(u_1, w_1) - f(u_2, w_2)) (u_1 - u_2) &= 0, \\ \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w_1 - w_2\|_H^2 + \int_H (g(u_1, w_1) - g(u_2, w_2)) (w_1 - w_2) &= 0. \end{aligned}$$

En ajoutant ces deux égalités (la première multipliée par $\mu > 0$) on voit apparaître l'expression

$$\int_H \int_0^1 (z_1(x) - z_2(x))^T \nabla F(\theta z_1(x) + (1 - \theta)z_2(x)) (z_1(x) - z_2(x)) d\theta dx$$

avec la notation $z_i = (u_i, w_i)$, $i = 1, 2$. On peut en déduire l'unicité des solutions grâce à une inégalité de Gronwall.

Théorème 1.8 (Unicité des solutions faibles) *Supposons que f et g sont $C^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$, et que la forme quadratique $Q(z) = \frac{1}{2}(\nabla F_\mu^T + \nabla F_\mu)$ définie sur \mathbb{R}^2 est bornée à gauche, c'est à dire*

$$\exists \mu > 0, \exists C \in \mathbb{R}, \forall z \in \mathbb{R}^2, \quad Q(z) \geq C|z|^2.$$

Alors (1.42)-(1.47) à une unique solution faible.

Commentaires.

Il s'agit de deux résultats différents. Le résultat d'existence de solutions fortes est seulement local en temps et demande beaucoup de régularité aux données et à la condition initiale. Mais il s'applique à tous les modèles ioniques définis à partir de fonctions localement Lipschitziennes. L'unicité est démontrée dans ce cas.

Le résultat d'existence de solutions faibles restreint le choix du modèle ionique, mais avec une régularité minimale des données, et il est global en temps. L'unicité reste un problème ouvert en général.

Enfin, les résultats numériques montrent que les solutions semblent être bornées dans L^∞ comme les solutions des équations monodomaines, c'est à dire dans un rectangle invariant pour f et g , du type de celui de la figure 1.5. Pour l'instant, ce résultat n'est ni confirmé ni infirmé par l'analyse.

Parmi les modèles qui vérifient les hypothèses 1. à 3. d'existence de solutions faibles, citons

- le modèle de Aliev-Panfilov [37]

$$f(u, w) = ku(u - a)(u - 1) + uw, \quad g(u, w) = \epsilon(ku(u - 1 - a) + w),$$

- le modèle de FitzHugh-Nagumo [68]

$$f(u, w) = u(u - a)(u - 1) + w, \quad g(u, w) = -\epsilon(ku - w),$$

- Le modèle de McCulloch [96]

$$f(u, w) = bu(u - a)(u - 1) + uw, \quad g(u, w) = \epsilon(-ku + w).$$

Nous avons pu démontrer l'unicité des solutions seulement pour le modèle de FitzHugh-Nagumo.

1.3.2 Un problème de calcul scientifique : l'électrocardiogramme

Le calcul de solutions approchées des équations bidomaines écrites avec un milieu extracardiaque (le thorax), si possible dans un domaine 3D réaliste, constitue le modèle le plus précis, avec les meilleures fondations physiques et physiologiques, pour rendre compte du champ électrique créé par le fonctionnement du coeur dans le thorax. Il donne donc accès à une compréhension fine de l'électrocardiogramme, à *condition de pouvoir calculer des solutions approchées valides*.

Pour de nombreuses raisons, exposées plus loin, calculer des solutions approchées des équations bidomaine est un problème complexe, qui peut faire appel à des techniques complexes de calcul scientifique, si l'on veut obtenir des résultats précis sur des domaines 3D (voir [69, 53, 84, 48, 44, 64]).

Le problème complet est constitué des équations des potentiels intra et extracellulaires (1.15), (1.16), thoracique (1.12), des équations de modèles ioniques (1.1)-(1.3), des conditions d'interface (1.13) et de la condition de bord (1.14). Comme dans le cas « isolé » on peut le mettre sous la forme variationnelle :

$$A_m \left(C_m \frac{d}{dt}(V, U) + \langle I_{ions}, V \rangle \right) + b((V, \phi), (U, \psi)) = 0, \quad (1.60)$$

avec cette fois

$$b((V, \phi), (U, \psi)) = a_i(V + \phi, U + \phi) + a_{e,T}(\phi, \psi) \quad (1.61)$$

où $a_i(V, U) = \int_H G_i \nabla V \cdot \nabla U$ et $a_{e,T}(\phi, \psi) = \int_\Omega \bar{G} \nabla \phi \cdot \nabla \psi$ pour

$$\forall x \in \Omega, \quad \bar{G}(x) = \begin{cases} G_e(x) & \text{si } x \in H, \\ G_T(x) & \text{si } x \in T. \end{cases} \quad (1.62)$$

Les inconnues sont donc $V(t) \in H^1(H)$ et $\phi(t) \in H^1(\Omega)$ et les fonctions tests sont $U \in H^1(H)$ et $\psi \in H^1(\Omega)$. On trouve les potentiels extracellulaires et extracardiaques comme les restrictions de ϕ ,

$$\phi_e = \phi|_H \in H^1(H), \quad \phi_T = \phi|_T \in H^1(T).$$

Remarque 1.3 À partir de la forme (1.60)-(1.62), on peut appliquer la technique de démonstration d'existence de solutions faibles de [3] pour démontrer l'existence de solutions faibles des équations bidomaine couplées, voir [43].

La forme bilinéaire $a_{e,T}$ est anisotrope et hétérogène, avec des coefficients discontinus, sur $\Sigma = \bar{H} \cap \bar{T}$, et éventuellement à l'intérieur de T si l'on veut rendre compte de l'in-homogénéité du thorax T . Pour cette raison, et aussi parce que le couplage coeur-thorax à lieu à travers la conditions d'interface (1.13) qui porte sur les flux de courant, nous avons choisi de développer une méthode de volumes finis pour approcher les solutions du problème bidomaine.

En plus d'être plus adaptée aux discontinuités de \bar{G} , cette approximation permet l'utilisation de maillages du coeur et thorax avec un raccordement non conforme, ou encore l'utilisation d'algorithmes d'adaptation de maillage dynamique, de type AMR [41] par exemple.

Le schéma utilisant un flux approché à 2 points, utilisé dans [4] n'a plus d'intérêt ici, puisque l'on a deux matrices de conductivité différentes, G_i et G_e dans le même domaine : on ne pourra en général jamais construire de maillage *admissible* pour les 2 métriques en même temps. C'est pourquoi nous avons développé en 3D une méthode de type DDFV (*Discrete Duality Finite Volume*) [17]. En effet ces méthodes conservent la symétrie du problème, se comporte très bien en présence d'anisotropie et d'hétérogénéités, et approchent les flux de manière très précise [77]. L'extension en dimension 3 des schémas DDFV est un résultat innovant, présenté dans la partie 2.2 de ce document [17, 1].

Quelle que soit la technique employée, la discrétisation en espace s'écrit à l'aide de deux matrices, $K^{(i)}$ et K ,

$$A_m C_m (V' + I_{ions}(V, W)) + K^{(i)}(V + \phi) = 0 \quad (1.63)$$

$$K^{(i)}V + K\phi = 0 \quad (1.64)$$

$$W' = G(V, W) \quad (1.65)$$

Si on utilise une base de Galerkin $(\psi_j)_j$ de $H^1(\Omega)$ (éléments finis conformes), on aura $K = K^{(i)} + K^{(e)} + K^{(T)}$ et avec une matrice de masse M ,

$$MK_{ij}^{(i),(e)} = \int_H G_{i,e} \nabla \psi_j \cdot \nabla \psi_i, \quad MK_{ij}^{(T)} = \int_T G_T \nabla \psi_j \cdot \nabla \psi_i, \quad M_{ij} = \int_H \psi_j \psi_i.$$

Le résultat est le même avec la méthode DDFV, et $K^{(i)}$, K , $K^{(T)}$ sont les matrices des opérateurs Volumes Finis discrets $-\text{div}_h(G_{i,h} \nabla_h \cdot)$ et $-\text{div}_h(G_{i,h} \nabla_h \cdot) - \text{div}_h(\bar{G}_{i,h} \nabla_h \cdot)$. De même les matrices $MK^{(i)}$ et MK sont symétriques et positives, avec pour la matrice de masse $M = \text{diag}(|K_i|)$ où $(K_i)_i$ sont les volumes de contrôle du maillage et $|K_i|$ leurs volumes.

Remarque 1.4 Dans la discrétisation par volumes finis, la condition d'interface (1.13) est écrite au sens fort car on discrétise les opérateurs différentiels à l'aide de flux numériques, alors qu'en éléments finis, la condition d'interface est prise en compte implicitement à travers la formulation variationnelle, au sens faible.

Comme nous l'expliquons dans [33, 16], d'un point de vue méthodologique, il faut donc

1. une technique de discrétisation en temps de l'équation d'évolution de type réaction-diffusion (1.63),

2. une technique de résolution du système linéaire (1.64),
3. une technique de discrétisation en temps du système d'équations différentielles (1.65) du modèle de membrane.

Comme dans le cas du modèle monodomaine (section 1.2), les échelles de temps des variables du modèle de membrane sont très variées et la solution est formée d'ondes progressives ayant des fronts raides. Les difficultés numériques sont donc les mêmes : *propagation failure*, précision sur les grandeurs physiologiques, vitesses des fronts et phénomène de repolarisation, pour des paramètres réalistes ($A_m = 2000 \text{ cm}^{-1}$) qui imposent un maillage très fin (au plus 0.1 mm), petit pas de temps (moins de 1 ms en implicite, jusqu'à 10^{-2} ms en explicite, suivant le maillage, voir aussi [69]). Mais cette fois, il faut résoudre le système linéaire (1.64) à chaque pas de temps.

Dans [33, 16], nous avons fait des calculs sur de longues durées, pour couvrir plusieurs battements cardiaques, avec le schéma d'Euler explicite en temps pour (1.63) et une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 pour (1.65). Le système linéaire (1.64) est mieux conditionné sous sa forme non symétrique que sous sa forme symétrique (prémultiplié par M). Il reste malgré tout très mal conditionné puisqu'il s'agit d'un problème anisotrope avec coefficients discontinus et conditions de bord Neumann homogène. Nous avons utilisé les méthodes BiCGStab et GMRes avec comme préconditionneur un algorithme ILU(p) [97] utilisé après renumérotation (algorithme de Cuthill-MacKee symétrique inverse). Comme la matrice ne change pas au cours des itérations en temps, on calcule le préconditionneur une seule fois, avant les calculs. Le système linéaire doit être résolu à chaque pas de temps de manière très précise pour minimiser l'erreur en temps long.

Enfin nous n'avons pu faire que des calculs en 2D : d'une part, nous ne disposions pas de maillages 3D assez fins, d'autre part notre code séquentiel ne permettait pas de le résoudre assez rapidement.

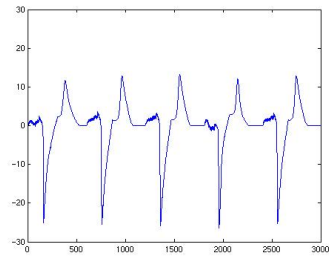
Nous avons choisi une géométrie 2D de dimensions réalistes, avec des paramètres et des modèles ioniques de tissu ventriculaire issus de la littérature en électrophysiologie. L'objectif était de montrer des électrocardiogrammes de surface correspondant à l'observation clinique. Plusieurs situations ont été simulées :

1. rythme normal (100 battements par minutes - BPM), une électrode de stimulation,
2. rythme normal (100 BPM), deux électrodes de stimulation,
3. tachycardie (240 BPM), deux électrodes de stimulation,
4. ischémie, 100 BPM, deux électrodes de stimulation.

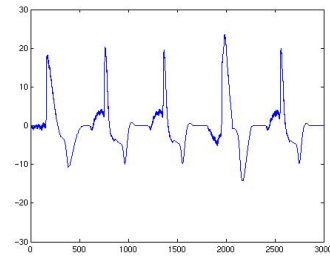
D'un point de vue pratique, nous avons observé que la résolution du système linéaire avec un petit résidu (10^{-7}) est très coûteuse (plusieurs centaines d'itérations), que le préconditionnement est indispensable, et que ILU(0) est un bon compromis pour résoudre le système linéaire, et que cette résolution occupe jusqu'à 90% (99% en 3D) du temps CPU. Tous ces résultats sont publiés dans [33, 16].

1.4 L'équation eikonale

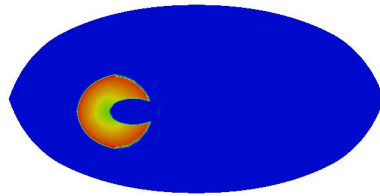
En imagerie médicale clinique, il peut être demandé d'obtenir des résultats en *temps réel* ou au moins très rapidement. Pour cela, on peut utiliser un modèle très simple, qui ne rend compte que de la position du front de dépolarisation dans les ventricules : puisque ce front est très rapide, on peut faire un développement asymptotique en son voisinage,



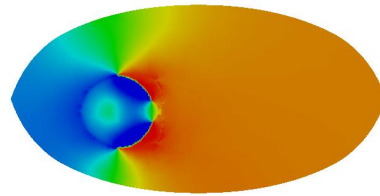
(a) ECG, électrode 1



(b) ECG, électrode 2



(c) Potentiel de membrane V



(d) Potentiel ϕ

FIG. 1.7 – Stimulation 1 site, 100 BPM, potentiels à $t = 140\text{ms}$

et obtenir une équation approchée pour sa propagation. Elle a la forme d'une équation Eikonale,

$$c\sqrt{kdG}\|\nabla T\| - dG\kappa(T) = 1, \quad (1.66)$$

ou bien

$$c\sqrt{kdG}\|\nabla T\| - dG\Delta T = 1, \quad (1.67)$$

où $\kappa(T) = \|\nabla T\| \operatorname{div} \left(\frac{\nabla T}{\|\nabla T\|} \right)$ est la courbure, k, d, G sont les paramètres des équations du modèle de Aliev-Panfilov et c est la vitesse d'une onde monodimensionnelle de ce modèle, $c = \sqrt{\frac{dGk}{2}}(1 - 2a)$. On obtient l'équation (1.66) à partir du modèle monodomaine [81], et l'équation (1.67) à partir du modèle bidomaine [51]. Dans ces équations, l'inconnue est $T(x) \geq 0$, l'instant de passage du front de dépolarisation.

La fonction T est assez régulière pour qu'un maillage beaucoup plus grossier soit suffisant pour obtenir précisément la solution numérique. L'algorithme du *Fast-Marching* de J. Sethian [99] permet de résoudre ce problème très rapidement, partant d'une position initiale du front, par exemple la ligne $T = 0$.

Dans [11] nous avons proposé d'adapter cet algorithme à l'équation (1.66), et avons obtenu de bons résultats, applicables d'un point de vue clinique. En particulier, grâce à une méthode itérative d'identification, nous avons pu détecter une région infarctique du myocarde (comme une zone de moindre vitesse du front).

Une étude rigoureuse de l'algorithme proposé pour (1.66) reste à faire.

Notons enfin que ce modèle est très limité. Il ne rend pas compte de la complexité des phénomènes électrophysiologiques de membrane, de l'effet de l'enchaînement des battements, de la repolarisation, etc.

En juin et juillet 2007, A. Assani et R. Cchay ont travaillé avec moi pour leur stage de Master 2 Recherche sur la méthode du *Fast-Sweeping* introduite dans [110]. L'intérêt de cette méthode est d'être beaucoup plus simple à implémenter que la méthode du *fast-marching* [99]. Par ailleurs, elle peut-être combinée à des schémas d'ordre élevé, utilisé sur des maillages nonstructurés [95, 109]. L'utilisation de cette méthode est en cours d'étude avec M. Sermesant, dans la suite des travaux de [11].

Chapitre 2

Méthodes de volumes finis

Depuis le début de ma thèse, j'étudie les méthodes de volumes finis pour l'approximation des EDP, parce qu'elles permettent

- l'utilisation de maillages très généraux, maillages tordus, raffinement automatique ;
- la résolution de problème peu réguliers, en particulier à coefficients discontinus ou anisotropes, ou non linéaires ;
- l'obtention de schémas simples et faciles à implémenter.

Ces méthodes s'utilisent principalement pour des équations sous forme de lois de conservation. Elles ont été introduites pour résoudre des problèmes hyperboliques non-linéaires la plupart du temps en mécanique des fluides. Mais elles sont maintenant utilisées pour des problèmes visqueux ou plus généralement des problèmes avec un terme de diffusion, par exemple en dynamique des milieux poreux [38, 66], ou encore en biomathématiques (voir partie 1).

L'équation modèle dont je recherche une solution approchée est donc l'équation de diffusion pure

$$-\operatorname{div}(G\nabla u) = f \text{ dans } \Omega; \quad (2.1)$$

ou bien l'équation de convection-diffusion

$$\operatorname{div}(bu - G\nabla u) = f \text{ dans } \Omega; \quad (2.2)$$

dans chaque cas avec des conditions aux limites de Dirichlet ou Neumann sur le bord $\partial\Omega$; et avec des conditions classiques, $\operatorname{div}(b) \geq 0$ et $G = G(x)$ uniformément elliptique.

Classiquement, la solution approchée est une fonction constante par morceaux sur un maillage nonstructuré de Ω , représentant les valeurs moyennes par mailles de la solution exacte. Le schéma est basé sur la formulation intégrale de l'équation (2.1) ou (2.2), et la difficulté est donc d'écrire une formule consistante pour la discrétisation des flux de diffusion (voir la littérature pour les flux de convection), puisque ceux-ci s'expriment à partir du gradient de la solution, dans une direction pour un problème linéaire $G\nabla u \cdot n$, ou en fonction de tout le gradient pour un problème non linéaire, $\varphi(x, \nabla u(x))$.

Il s'agit d'utiliser des maillages non structurés éventuellement très irréguliers. Des difficultés surviennent en particuliers si G est anisotrope ou discontinu. La plupart du temps, les schémas sont aussi très précis pour des problèmes non-linéaires [38, 65]

J'ai introduit le schéma connu sous le nom de « schéma diamant » pendant ma thèse et démontré des résultats de convergence, et des estimations d'erreur L^2 dans [37, 8, 9] sur des maillages non structurés, dont les maillages raffinés de type AMR [41, 39]. Les estimations d'erreurs sont étendues à tous les espaces L^p dans [6] où l'on démontre des inégalités de Sobolev discrètes.

Dans [4] nous démontrons un résultat de convergence et une estimation d'erreur pour un système d'équations de réaction-diffusion, avec le schéma sur *maillages admissibles* de [65].

Pendant la thèse de C. Pierre [94] nous avons de préférence utilisé la méthode dite « DDFV » étudié par P. Omnès et K. Domelevo [59], avec laquelle nous obtenons un schéma symétrique et très précis sur des maillages déformés. Nous avons introduit une extension 3D de cette méthode conservant les mêmes propriétés (symétrie, formule de Green discrète, robustesse, précision) [17, 1, 33, 16].

Nous avons travaillé, avec F. Hubert, sur une nouvelle extension 3D du schéma DDFV, plus naturelle et plus générale que la précédente. Notre nouveau schéma, élégant et simple à implémenter est décrit dans [15]. La convergence pour des problèmes non linéaires est démontrée dans [30].

Pour un problème de convection-diffusion, la méthode DDFV peut-être utilisée parce qu'elle reconstruit des gradients très précis ; et donc une reconstruction affine par morceaux précise. C'est ce que nous démontrons avec G. Manzini dans [2] où nous proposons une famille de reconstructions basées sur les gradients DDFV. On obtient alors un schéma d'ordre 2 pour l'équation (2.2), au moins en régime diffusif. Choisir et étudier des limiteurs de pentes pour le régime convectif est un travail complémentaire en cours. Au delà, nous pensons que cette méthode est prometteuse pour les cas tests difficiles dans le domaine des système hyperboliques non linéaires.

2.1 Le schéma « diamants »

2.1.1 Présentation du schéma

Maillages.

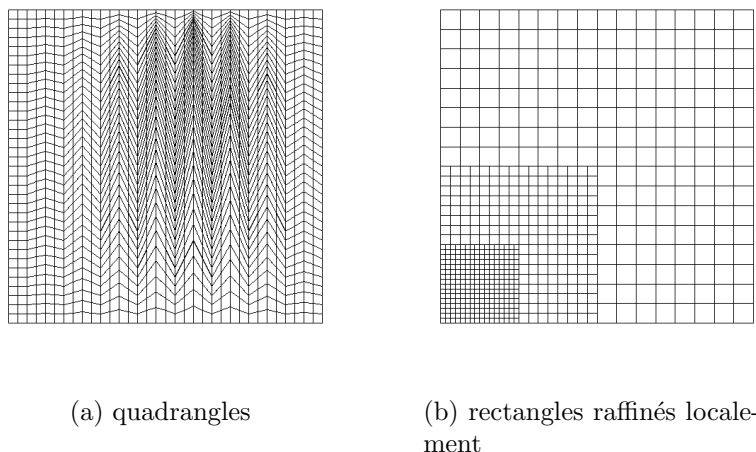


FIG. 2.1 – Maillages volumes finis du benchmark FVCA 5 [77]

Considérons un maillage \mathcal{T}_h de Ω en *volumes de contrôle* polygonaux, notés $K \in \mathcal{T}_h$. L'inconnue discrète est alors une fonction constante par morceaux dans les $K \in \mathcal{T}_h$, de valeurs $u_h = (u_K)_{K \in \mathcal{T}_h}$. On note \mathbf{U}_h l'espace vectoriel de ces fonctions.

Remarque 2.1 *Les maillages possibles sont très généraux. Il peuvent comporter toutes sortes de polygones, et en particulier des maillages très distordus ou raffinés localement (fig. 2.1).*

Flux numériques.

L'équation intégrale sur K associée à (2.1) est

$$-\int_{\partial K} G(x) \nabla u(x) \cdot \mathbf{n}(x) d\sigma(x) = \int_K f(x) dx. \quad (2.3)$$

Le second membre est calculé soit explicitement soit par une méthode d'intégration numérique. Les mailles K étant polygonales, le membre de gauche fait intervenir *les flux de diffusion* sur les faces, notées e , de K :

$$F_{Ke}^E(u) = \int_e G(x) \nabla u(x) \cdot \mathbf{n}(x) d\sigma(x). \quad (2.4)$$

Ce sont ces flux qui sont difficiles à calculer, puisque l'on ne dispose que d'une solution constante par morceaux sur les $K \in \mathcal{T}_h$.

Cellules diamants, gradients discrets.

Autour de chaque interface $e = K \cap L$ entre deux volumes de contrôle $K, L \in \mathcal{T}_h$, on peut construire un polygone noté D_e et appelé *cellule diamant* comme la réunion des enveloppes convexes de $\{e, x_K\}$ et $\{e, x_L\}$; les points x_K et x_L sont les centres (par exemple de gravité) de K et L , figure 2.2. L'ensemble des cellules diamant constitue un maillage de Ω noté \mathcal{D}_h .

Le principe du schéma diamant est de calculer un gradient approché par interface e comme la moyenne sur le diamant D_e du gradient d'une fonction \tilde{u}_h interpolant les valeurs u_K, u_L et des valeurs $(u_A)_A$ aux sommets x_A du polygone D_e . Le gradient d'une fonction $u_h \in \mathbf{U}_h$ obtenu de cette manière est une fonction constante par morceaux sur les $D_e \in \mathcal{D}_h$, notée $\nabla_h u_h = (\nabla_e u_h)_{D_e \in \mathcal{D}_h}$, définie par

$$\nabla_e u_h = \frac{1}{|D_e|} \int_{D_e} \nabla \tilde{u}_h = \frac{1}{|D_e|} \int_{\partial D_e} \tilde{u}_h \mathbf{n}.$$

Si l'interpolation \tilde{u}_h est affine sur les facettes composant ∂D_e , l'expression du gradient se calcule très simplement, en dimension quelconque $d \geq 2$, car les facettes composant ∂D_e sont des polygones à d sommets. On obtient en 2D l'expression ci-dessous.

Théorème 2.1 (Expressions du gradient) *Le vecteur gradient est aussi l'unique solution du système $\nabla_e u_h \cdot (x_E - x_W) = u_E - u_W$ et $\nabla_e u_h \cdot (x_N - x_S) = u_N - u_S$. Il s'écrit*

$$\nabla_e u_h = \frac{1}{D_e} ((u_E - u_W) \mathbf{N}_{WE} + (u_N - u_S) \mathbf{N}_{SN}) \quad (2.5)$$

où $D_e = \det(x_E - x_W, x_N - x_S)$, $\mathbf{N}_{WE} = (x_S - x_N)^\perp$, $\mathbf{N}_{SN} = (x_E - x_W)^\perp$ et \cdot^\perp est la rotation d'angle $+\pi/2$.

Une expression similaire existe en 3D; elle est donnée explicitement dans [6].

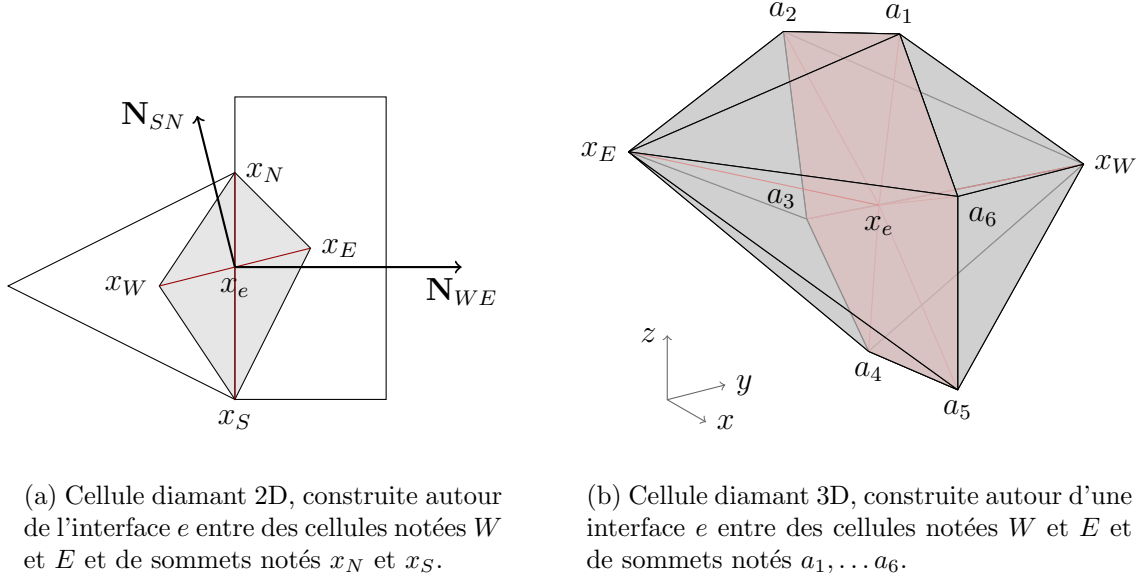


FIG. 2.2 – Cellules diamant

Interpolation aux sommets.

Dans la méthode que j'ai proposée, les valeurs aux sommets, u_N et u_S dans (2.5) sont calculés par interpolation. Si $\mathcal{V}_h = \{A \text{ sommet}\}$ désigne l'ensemble des sommets A de coordonnées x_A du maillage, on prend

$$u_A = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} y_{AK} u_K \quad (2.6)$$

si $A \in \Omega$. Si $A \in \partial\Omega$ alors on choisit u_A en fonction de la donnée au bord, comme détaillé dans [9, 8, 37]. Par exemple pour une donnée de Dirichlet g continue on prend $u_A = g(x_A)$. Le cas des données de Neumann est plus complexe. Une solution consistante est décrite dans [9].

Remarque 2.2 (Poids d'interpolation) *Les coefficients réels $(y_{AK})_{A \in \mathcal{V}_h, K \in \mathcal{T}_h}$ sont des poids d'interpolation. Ces poids sont le principal paramètre du schéma. Les propriétés essentielles du schéma (consistance, stabilité) sont déterminés par ces poids. Ils peuvent avoir une influence sur le comportement du schéma dans certaines circonstances (principe du maximum par exemple).*

Le schéma.

Le schéma s'écrit donc

$$\forall K \in \mathcal{T}, \quad - \sum_{e \in \mathcal{E}_K} G_e \nabla_e u_h \cdot \mathbf{N}_{Ke} = f_K |K|, \quad (2.7)$$

où $\mathbf{N}_{Ke} = \int_e \mathbf{n}_{Ke} = N_{WE}$ (resp. \mathbf{N}_{EW} – cf thm 2.1) si $K = W$ (resp. $K = E$) et $G_e = \frac{1}{|e|} \int_e G(x) d\sigma(x)$; on a noté $f_K = \frac{1}{|K|} \int_K f(x) dx$.

Remarque 2.3 *Le système (2.7) est un système linéaire posé dans \mathbf{U}_h , dont l'inconnue est la fonction u_h . Ce système linéaire n'est pas symétrique.*

D'un point de vue pratique, il est simple à implémenter puisque les poids sont déterminés *a priori* (stockés dans une matrice creuse par exemple) et le flux peut s'écrire

$$\int_e G(x) \nabla_e u_h \cdot \mathbf{n}_{We} = \alpha_e(u_E - u_W) + \beta_e(u_N - u_S)$$

pour une cellule $K = W$ de voisin E le long de l'interface e . Comme les poids d'interpolation, les coefficients sont déterminés une fois pour toute :

$$\forall e \in \mathcal{E}, \quad \alpha_e = \frac{G_e \mathbf{N}_{WE} \cdot \mathbf{N}_{WE}}{D_e}, \quad \beta_e = \frac{G_e \mathbf{N}_{WE} \cdot \mathbf{N}_{SN}}{D_e}. \quad (2.8)$$

Un expression analogue existe en 3D, voir dans [6].

Implémentation.

Du point de vue de *l'implémentation*, on peut

- assembler la matrice de l'opérateur de diffusion discret, à l'aide d'une boucle sur les arêtes du maillages (choix pour la résolution par une méthode directe par exemple) ; il suffit alors de distribuer les contributions α_e et β_e ; la matrice des poids n'est plus utile après assemblage ;
- stocker simplement les coefficients $(\alpha_e)_{e \in \mathcal{E}}$ et $(\beta_e)_{e \in \mathcal{E}}$, et les poids $(y_{AK})_{A,K}$; choix qui peut être plus adapté au raffinement dynamique de maillage.

2.1.2 Principe de l'analyse

L'analyse numérique de cette méthode à été introduite dans [37] et est publiée dans [9, 8, 6]. Elle reprend la démonstration de [76] pour obtenir des résultats de convergence avec estimations d'erreurs.

On considère des maillages $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ indexés par leurs tailles $h = \max_{K \in \mathcal{T}_h} \text{diam}(K)$ vérifiant des hypothèses de régularités classiques,

$$\exists \alpha, \beta, \gamma > 0, \quad \forall h > 0, \quad \forall K \in \mathcal{T}_h, \quad \alpha h^2 \leq |K|, \quad \text{card}(\mathcal{E}_K) \leq \gamma, \quad \forall e \in \mathcal{E}_K, \quad \beta h \leq |e|.$$

Ces hypothèses assurent la non dégénérescence des mailles.

Espaces discrets, produits scalaires, inégalité de Poincaré.

La solution approchée est donc dans l'espace \mathbf{U}_h qu'il faut voir comme un équivalent discret de $H_0^1(\Omega)$ ¹. On définit donc les produits scalaires suivants pour $u_h = (u_K)_{K \in \mathcal{T}}$ et $v_h = (v_K)_{K \in \mathcal{T}}$,

$$(u_h, v_h)_{0,h} = \int_{\Omega} u_h v_h = \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K v_K |K|, \quad (2.9)$$

$$(u_h, v_h)_{1,h} = \sum_{e \in \mathcal{E}_h^i} \frac{u_E - u_W}{h_e} \frac{v_E - v_W}{h_e} D_e + \sum_{e \in \mathcal{E}_h^b} \frac{u_W}{h_e} \frac{v_W}{h_e} D_e, \quad (2.10)$$

où $h_e = (x_E - x_W) \cdot \mathbf{n}_{WE}$ (\mathbf{n}_{WE} est la normale unitaire à e dirigée de W vers E), et \mathcal{E}_h^i (resp. \mathcal{E}_h^b) est l'ensemble des interfaces du maillages (resp. des faces du bord). L'équation (2.10) définit bien un produit scalaire grâce à l'inégalité de Poincaré (2.11) ci dessous.

¹on peut toujours se ramener à un problème homogène par relèvement, ou encore on raisonne sur l'erreur $\varepsilon_h := \pi_h u - u_h$ qui vérifie les conditions aux limites homogènes

Théorème 2.2 (Inégalité de Poincaré) *Quel que soit $u_h \in \mathbf{U}_h$ on a*

$$\|u_h\|_{0,h} \leq \zeta \operatorname{diam}(\Omega) \|u_h\|_{1,h} \quad (2.11)$$

où $\zeta = \sup_{h>0, D_e \in \mathcal{D}_h} \frac{h^d}{D_e} < +\infty$ (non dégénérescence des maillages).

La généralisation de ce résultat à des maillages très généraux est un résultat introduit dans [9, 37].

Coercivité discrète.

La difficulté principale avec le schéma diamant est que la forme bilinéaire qui apparaît dans l'analyse,

$$a_h(u_h, v_h) = - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} v_K \sum_{e \in \mathcal{E}_K} G_e \nabla_e u_h \cdot \mathbf{N}_{Ke} \quad (2.12)$$

définie sur \mathbf{U}_h par analogie avec $a(u, v) = - \int_{\Omega} v \operatorname{div}(G \nabla u)$ dans $H_0^1(\Omega)$ ne vérifie pas l'équivalent discret de la formule de Green $a(u, v) = \int_{\Omega} G \nabla u \cdot \nabla v$ (dans $H_0^1(\Omega)$). En particulier, elle n'est pas symétrique comme on l'a remarqué plus haut.

Définition 2.1 (Coercivité discrète) *On définit néanmoins la coercivité des $(a_h)_{h>0}$ sur les maillages $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ comme la propriété :*

$$\exists \alpha > 0, \forall h > 0, \forall u_h \in \mathbf{U}_h, \quad \alpha \|u_h\|_{1,h}^2 \leq a_h(u_h, u_h). \quad (2.13)$$

Remarque 2.4 *L'existence de l'inégalité (2.13) et la valeur de $\alpha > 0$ dépendent de la famille de maillages considérée et aussi de l'interpolation $Y = (y_{AK})$ choisie. Pour l'instant, il n'existe aucune technique qui permette d'obtenir cette inégalité en général. C'est le point d'achoppement de ce schéma. Cependant, j'ai pu l'obtenir que dans deux situations importantes en pratiques en 2D : sur des maillages de quadrangles [9] et des maillages de rectangles localement raffinés [8], comme ceux de la figure 2.1. Ces résultats sont rappelés brièvement ci-dessous.*

Le problème discret

C'est un système linéaire carré non symétrique mais qui a une solution unique si le schéma est coercif (déf 2.1) puisque le système (2.7) est équivalent à la formulation variationnelle

$$\forall v_h \in \mathbf{U}_h, \quad a_h(u_h, v_h) = (f_h, v_h). \quad (2.14)$$

Consistance des flux numériques.

Soit la projection $\pi_h u \in \mathbf{U}_h$ de la solution exacte $u \in H^1(\Omega)$ définie par $\pi_h u = (\pi_K u)_{K \in \mathcal{T}_h}$ où

$$\pi_K u = \frac{1}{|K|} \int_K u(x) dx. \quad (2.15)$$

La projection (2.15) est celle de mes premiers travaux [9, 8, 6]. On peut aussi prendre $u_K = u(x_K)$ si l'on suppose $u \in H^2(\Omega) \subset C^0(\bar{\Omega})$ ².

²inégalité de Sobolev en dimensions $d = 1, 2, 3$

Théorème 2.3 (Consistance des flux) *Si les x_K sont les centres de gravité des $K \in \mathcal{T}$ et si les poids vérifient l'hypothèse de consistance*

$$\exists \gamma > 0, \forall h > 0, \forall A \in \mathcal{V}_h, \quad |y_{AK}| \leq \gamma, \quad \sum_{K \in \mathcal{T}_h} y_{AK} = 1, \quad \sum_{K \in \mathcal{T}_h} y_{AK}(x_K - x_A) = 0, \quad (2.16)$$

et si $u \in W^{2,p}(\Omega)$ pour un $p > 2$ alors les flux numérique sont consistant à l'ordre 1 : il existe $C > 0$ tel que, pour tout $h > 0$ et pour tout $e \in \mathcal{E}$, l'erreur de consistance notée $R_e(u)$ vérifie

$$R_e(u) := \frac{1}{|e|} \left| \int_e G \nabla u \cdot \mathbf{n}_e - \int_e G \nabla_e \pi_h u \cdot \mathbf{n}_e \right| \leq C \|G\|_\infty \|u\|_{W^{2,p}(\Omega)} h. \quad (2.17)$$

Remarque 2.5 *La démonstration est issue de [37, 9]. Elle améliore la démonstration de [76] et introduit la technique désormais classique utilisant des développement de Taylor avec reste intégral pour estimer l'erreur de consistance sur les flux numériques. Les estimations sont limitées à $u \in W^{2,p}(\Omega)$ pour des raisons techniques liées au choix de la projection (2.15). Ces résultats ont été améliorés en prenant $\pi_K u = u(x_K)$, ou des projections adaptées (voir [60]) : consistance en h^s pour $u \in H^{1+s}(\Omega)$ ($s > 0$), [74, 60].*

Dans mes travaux, je propose de choisir les poids (y_{AK}) obtenus en minimisant l'écart entre les valeurs u_K au voisinage de A et une fonction affine. On obtient automatiquement des poids vérifiant la condition de consistance (2.16). D'autres choix sont possibles et ont été testés.

Estimations d'erreur.

Il est alors assez simple de déduire les estimations d'erreur finales, suivant l'idée que

$$a_h(\pi_h u - u_h, v_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} v_h \sum_{e \in \mathcal{E}_K} R_{Ke}(u) \leq \|v_h\|_{1,h} \left(\sum_{e \in \mathcal{E}} |R_e(u)|^2 D_e \right)^{1/2},$$

où $R_{Ke}(u)$ est l'erreur de consistance sur les flux définie en (2.17). La deuxième inégalité fait suite à une intégration par partie discrète et à l'inégalité de Cauchy-Schwarz. En prenant $v_h = \pi_h u - u_h$ dans l'inégalité ci-dessus, on obtient l'estimation d'erreur en norme discrète $\|\pi_h u - u_h\|_{1,h}$ grâce aux inégalités de coercivité (2.13) et de consistance (2.17).

Théorème 2.4 (Estimation d'erreur) *Sur les maillages $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$, si les poids vérifient l'hypothèse de consistance (2.16), si les formes bilinéaires $(a_h)_{h>0}$ sont coercives (déf. 2.1) et si la solution exacte est $u \in W^{2,p}(\Omega)$ pour un $p > 2$ alors on a*

$$\alpha \|\pi_h u - u_h\|_{1,h} \leq C |\Omega| \|G\|_\infty \|u\|_{W^{2,p}(\Omega)} h \quad (2.18)$$

où les constantes $\alpha > 0$ et $C > 0$ sont celles de la définition 2.1 et du théorème 2.3. En conséquence,

$$\alpha \|\pi_h u - u_h\|_{0,h} \leq \zeta C |\Omega| \text{diam}(\Omega) \|G\|_\infty \|u\|_{W^{2,p}(\Omega)} h. \quad (2.19)$$

où ζ est la constante de l'inégalité de Poincaré (2.11).

Conclusion.

Les schémas brièvement décrits ici et développés depuis ma thèse [37], appelés « schémas diamants » sont simples à implémenter sur des géométries quelconques comportant des mailles également quelconques (fig. 2.1, très distordues ou bien avec du raffinement local non conforme). Leur construction repose sur une interpolation de l'inconnue aux noeuds du maillages (connaissant des valeurs moyennes par maille), et une formule (2.5) de calcul des gradients. Le choix de l'interpolation doit être consistant mais laisse néanmoins une très grande souplesse dans le schéma, qui lui confère une grande robustesse d'utilisation. C'est pourquoi il est souvent utilisé dans différents contextes. Il a aussi été amélioré de multiples manières, pour obtenir un principe du maximum, avec des coefficients discontinus [83, 82, 42] ...

Dans tous les cas, construire une interpolation consistante est assez simple, mais la démonstration de convergence n'est complète que si l'on sait prouver l'existence d'une constante de coercivité $\alpha > 0$ sur une famille de maillage $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ raisonnable. Une condition nécessaire assez simple est donnée dans [37]. On peut conjecturer que dans de nombreuses situations, cette condition est suffisante.

2.1.3 Le problème de convection-diffusion

Dans mes travaux, le problème de convection diffusion

$$\operatorname{div}(bu - G\nabla u) = f \quad \text{dans } \Omega, \quad u = g \quad \text{sur } \partial\Omega$$

($\operatorname{div}(b) \geq 0$ et G un tenseur de diffusion symétrique et uniformément elliptique) est traité. Toutefois, ma contribution ne concerne que la discrétisation des termes de diffusion, et leur utilisation possible dans ce cadre. Ainsi dans ces travaux, à l'exception de [2] avec G. Manzini, j'utilise le simple schéma décentré amont d'ordre 1 pour discrétiser le flux de convection. Il est naturellement consistant, et stable (grâce au décentrement). L'objectif n'était pas d'obtenir des estimations d'erreurs (théoriques ou numériques) optimales, mais bien de discrétiser le flux de diffusion. Ce n'est que dans [2] (voir plus loin) que je m'intéresse à l'obtention d'un schéma d'ordre deux pour un problème de convection-diffusion, utilisant donc des schémas plus complexes pour les flux de convection.

2.1.4 Convergence sur des maillages de quadrangles

D'après ce qui précède, la difficulté principale est donc de démontrer la propriété de coercivité 2.1. Dans [9], nous démontrons ce résultat pour des maillages *localement* constitués de quadrangles, comme sur la figure 2.3. La démonstration est très technique et repose sur l'idée que la forme bilinéaire a_h peut être vue comme une perturbation du produit scalaire $(\cdot, \cdot)_{1,h}$, bornée convenablement, de telle sorte que l'on obtient $a_h(u_h, u_h) \geq \alpha(1 - \gamma)\|u_h\|_{1,h}^2$. La constante $\gamma > 0$ est liée à la borne de la perturbation introduite par le schéma diamant dans le produit scalaire.

Sur des maillages de parallélogrammes, elle est facile à calculer, car les poids $y_{AK} = 1/4$ si A est un sommet de K et 0 sinon conviennent ; et on obtient $(1 - \gamma) > 0$. Comme les quadrangles sont obtenus par déformation affine de parallélogrammes, la constante γ des maillages de quadrangles est asymptotiquement égale à celle des parallélogrammes, d'où le résultat, théorème 2.5.

Théorème 2.5 (Maillages de quadrangles) Soit une famille $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ de maillages, tel que chaque \mathcal{T}_h peut être vu localement, autour d'un noeud A , comme une déformation $J_{A,h}$ d'une grille cartésienne (figure 2.3). Supposons que la famille des application $(J_{A,h})$ est uniformément bornée dans $C^2(\mathbb{R}^2)$. Alors il existe $h_0 > 0$ et $\alpha > 0$ tel que

$$\forall 0 < h < h_0, \forall u_h \in \mathbf{U}_h, \quad \alpha \|u_h\|_{1,h}^2 \leq a_h(u_h, u_h).$$

En conséquence, on obtient les estimations d'erreurs du thm 2.4.

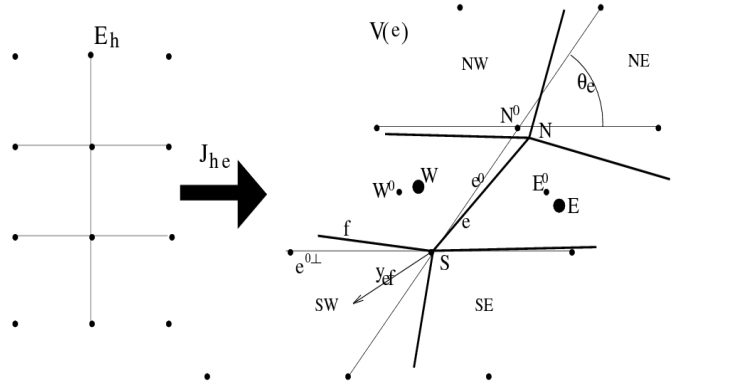


FIG. 2.3 – Maillages de quadrangles comme déformations locales de rectangles

2.1.5 Convergence sur des maillages de rectangles raffinés localement

Dans un second travail [8], je suggère l'idée que la forme bilinéaire a_h peut être décomposée comme une somme de contributions autour des noeuds du maillage. Notons $S_A = \{K \in \mathcal{T}_h, y_{AK} \neq 0\}$ le support de l'interpolation au noeud A . Alors on a

$$a_h(u_h, u_h) = \sum_{a \in \mathcal{V}_h} a_{h,A}(u_h, u_h),$$

où $a_{h,A}$ est une forme bilinéaire portant sur les $(u_K)_{K \in S_A}$,

$$a_{h,A}(u_h, u_h) = U_{h,A}^T \mathbb{M}(A) U_{h,A}, \quad U_{h,A} = (u_K)_{K \in S_A}$$

et $\mathbb{M}(A)$ est une matrice *locale*. En conséquence il suffit de montrer que les $\mathbb{M}(A)$ sont uniformément positives sur une famille de maillages pour obtenir le résultat.

Malheureusement les matrices $\mathbb{M}(A)$ n'ont pas d'expression simple en général [37]. Par contre, on peut démontrer qu'elles sont *invariantes par homothétie*; c'est à dire par changement d'échelle du maillage. Autrement dit, la coercivité ne dépend que de la géométrie, mais pas de la taille des mailles.

Alors, il suffit de remarquer que les maillages de rectangles raffinés localement (figure 2.1), très utilisé par les technique AMR [41, 39] se ramènent localement, par mise à l'échelle au voisinage S_A d'un noeud, à une famille finie de configurations de référence, voir la figure 2.4.

Dans chacune de ces 6 configurations, on calcule la forme bilinéaire locale $a_{h,A}$, dont la matrice $\mathbb{M}(A)$ est 4×4 au maximum; puis on détermine aisément sa plus petite valeur propre. Le résultat est énoncé au théorème 2.6.

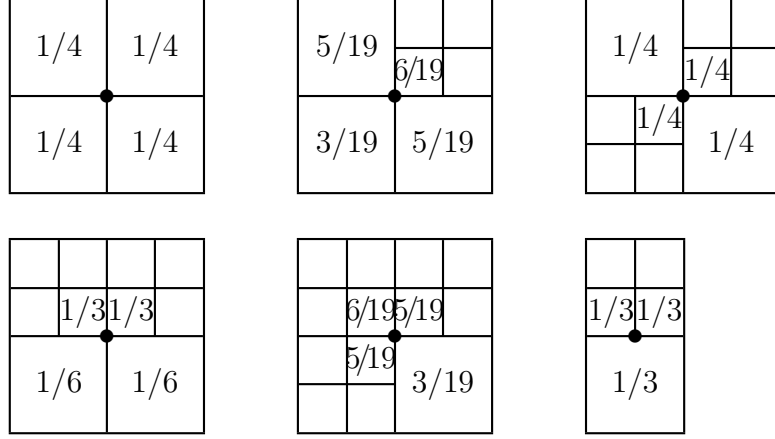


FIG. 2.4 – Configurations des maillages de rectangles, et poids

Théorème 2.6 (Maillages raffinés localement) *Considérons une famille $(T_h)_{h>0}$ de maillages obtenus par raffinement d'un maillage de rectangles structuré de pas Δx et Δy , avec au plus un raffinement entre deux mailles voisines, et $1/r \leq \Delta x/\Delta y \leq r$ pour $r = 3 + 2\sqrt{2}$. Il existe $\alpha > 0$ tel que*

$$\forall h > 0, \forall u_h \in \mathbf{U}_h, \quad \alpha \|u_h\|_{1,h}^2 \leq a_h(u_h, u_h).$$

On obtient les estimations d'erreurs du thm 2.4, cette fois pour $u \in H^2(\Omega)$.

Remarque 2.6 *En effet, puisqu'on dispose d'une famille finie de géométries de référence, on peut utiliser l'argument classique de mise à l'échelle basé sur le lemme de Bramble-Hilbert pour obtenir les estimations de consistance. La contrainte technique $u \in W^{2,p}(\Omega)$ pour un $p > 2$ tombe.*

2.1.6 Inégalités de Sobolev

Un des problèmes ouverts de l'analyse numérique des méthodes de volumes finis du type du schéma diamant est l'utilisation du lemme de dualité d'Aubin-Nietsche pour obtenir un résultat de *superconvergence* ($O(h^2)$) en norme L^2 à partir de l'estimation d'erreur ($O(h)$) en norme $\|\cdot\|_{1,h}$. On n'obtient donc aucune estimation d'erreur par ce biais, ni dans les L^p , ni dans L^∞ , alors que ces résultats sont classiques en éléments finis conformes.

Par contre, il est souvent possible de reproduire les démonstrations classiques d'analyse fonctionnelles dans les espaces de Sobolev dans le cadre discret volumes finis. C'est l'idée exploitée dans [6] où nous démontrons que les inégalités de Sobolev sont encore vraies, uniformément, sur une famille de maillages volumes finis, théorème 2.7.

Théorème 2.7 (Inégalités de Sobolev discrètes) *Sur une famille régulière $(T_h)_{h>0}$ (voir [6]) de maillages volumes finis, il existe une constante $C^{Sob} > 0$ telle que, quel que soit $1 \leq p < +\infty$ en 2D ou $1 \leq p \leq 6$ en 3D, on a*

$$\forall h > 0, \forall u_h \in \mathbf{U}_h, \quad \|u_h\|_{L^p(\Omega)} \leq C^{Sob} p \|u_h\|_{1,h}.$$

On peut déduire facilement de ces inégalités des estimations d'erreurs dans les espaces L^p [6].

Théorème 2.8 Avec les hypothèses du théorème 2.4, on obtient, pour $1 \leq p < +\infty$ en 2D et $1 \leq p \leq 6$ en 3D,

$$\|\pi_h u - u_h\|_{L^p(\Omega)} \leq C^{Sob} p h;$$

et

$$\|\pi_h u - u_h\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C^{Sob} h(1 + \log h) \text{ (2D)}, \quad \text{ou } \|\pi_h u - u_h\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C^{Sob} h^{1/2} \text{ (3D)}.$$

2.2 Méthodes Volumes Finis DDFV

L'idée de considérer les valeurs aux noeuds, utilisées dans la formule du schéma diamant, comme des inconnues constitue une avancée méthodologique importante. C'est une idée des années 1980-1990 [90, 92, 78, 79], qui a été étudiée récemment par P. Omnès et K. Domelevo [59], en dimension 2. La méthode d'approximation correspondante combine 2 schémas volumes finis écrits sur 2 maillages du domaine de calcul Ω , le maillage primaire \mathcal{T}_h de cellules notées K , L , et un maillage secondaire \mathcal{V}_h , dont les volumes de contrôle sont construits autour des noeuds du maillage primaire. Le schéma obtenu de cette manière fait intervenir des opérateurs gradients (formule du schéma diamant) et divergence (méthode de volumes finis) discrets. Ces opérateurs vérifient une propriété de dualité discrète équivalente à une formule d'intégration par partie (formule de Green), d'où le nom de la méthode, *Discrete Duality Finite Volume*, DDFV. Pour cette raison, elle se rapprochent aussi des méthodes de différences finies mimétiques, voir par exemple [46].

Les intérêts essentiels de ces méthodes sont leur robustesse et leur précision même pour des problèmes non linéaires, et sur des maillages très déformés. En particulier les gradients et donc les flux sont approchés de manière précise comme l'a montré le benchmark [77]. Elles ont été étendues aux cas de coefficients discontinus, de problème elliptiques non linéaires [38], de l'approximation d'équation en divergence-rotationnel [58, 91].

À l'occasion de la thèse de C. Pierre, nous avons proposé une première extension 3D symétrique de ces schémas [1] pour un problème à coefficient discontinu. Avec F. Hubert, nous proposons une seconde extension plus naturelle dans [15, 30], étudiée dans le cas non linéaire. Finalement, dans le cas 2D, nous montrons avec G. Manzini l'intérêt de ces méthodes pour la construction de schémas d'ordre 2 pour un problème de convection-diffusion [2]. Dans ce dernier article, nous remplaçons de plus les estimations de consistances usuelles en volumes finis, basées sur des développements de Taylor explicites, par des estimations plus classiques venant de la théorie de l'interpolation utilisée en éléments finis, voir par exemple [45].

2.2.1 Analyse numérique d'une méthode à 2 maillages en 3D

La construction du schéma DDFV en 2D repose sur l'idée que les deux maillages, primaire et secondaire, sont duaux l'un de l'autre au sens géométrique. Par exemple le maillage secondaire peut-être le maillage de Voronoï d'une triangulation de Delaunay de Ω . Alors chaque interface relie exactement 2 sommets du maillage primaire (définissant 2 mailles secondaires) et sépare exactement 2 mailles primaires : on peut regrouper les interfaces des maillages 2 par 2 de manière unique, et définir ainsi un 3e maillage, dont les mailles sont des quadrilatères : les *cellules diamants*, voir figure 2.5. Elles permettent d'écrire un gradient en calculant une différence divisée dans chacune des 2 directions des diagonales.

La généralisation en dimension 3 n'est pas immédiate, puisqu'alors une interface est un polygone plan qui contient $N > 2$ sommets du maillage primaire. Si le deuxième maillage est le maillage dual du maillage primaire, une interface du maillage primaire ne peut plus être associée à une unique interface du maillage secondaire. La construction précédente n'est plus valable.

Pendant la thèse de C. Pierre, nous avons introduit une généralisation en dimension 3 du schéma, qui conserve la propriété de dualité [21, 17, 1], pour une équation à coefficients discontinus. Elle fonctionne sur des maillages dont les interfaces $e = \bar{K} \cap \bar{L}$ sont des triangles ou des quadrangles. En effet, dans tous les cas, la différence finie dans la direction $x_L - x_K$ joignant les centres des cellules voisines donne une première dérivée partielle et

- si l'interface est un triangle, les 3 valeurs aux sommets définissent de manière unique un gradient dans l'interface,
- si l'interface est un quadrilatère, les différences finies dans les 2 directions des diagonales de e définissent les 2 dérivées partielles manquantes.

Dans ce cas, on peut donc construire le 3e maillage, des *cellules diamants* comme en 2D : en reliant les interface $e = \bar{K} \cap \bar{L}$ avec les centres des cellules K et L comme sur la figure 2.5.

Le 2nd maillage doit alors être un maillage dont les volumes de contrôle se recouvrent entre-eux (fig. 2.5) : la maille du maillage secondaire associé à un noeud x_A est construite en regroupant les volumes obtenus dans chaque interface $e = \bar{K} \cap \bar{L}$ dont x_A est un sommet en joignant x_K, x_L, x_A avec le centre x_e de e et les deux sommets de e les plus proches de x_A . Ceci est indispensable pour obtenir la formule de Green discrète. On note A le volume de contrôle associé au sommet de coordonnées x_A .

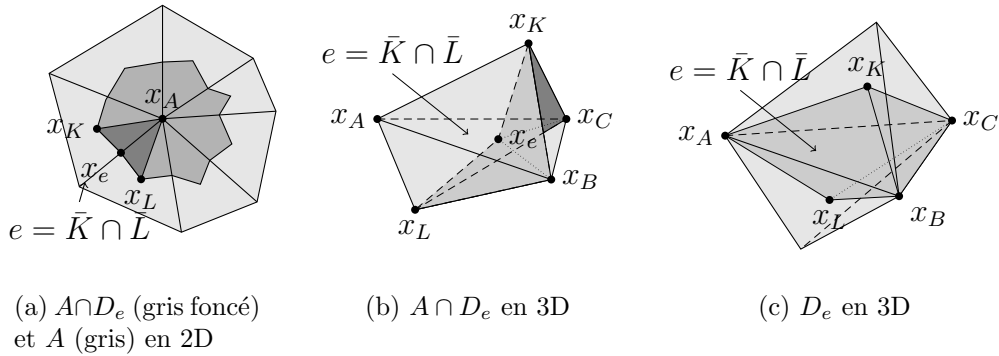


FIG. 2.5 – Maillage secondaire et maillage diamant

Remarque 2.7 En 2D, les cellules du maillage secondaire \mathcal{V}_h sont 2 à 2 disjointes et recouvrent exactement Ω , alors qu'en 3D elles se recouvrent 2 à 2 et recouvrent au total 2 fois le volume du domaine de calcul. On écrit donc

$$\sum_{A \in \mathcal{V}_h} |A| = (d-1)|\Omega|, \quad \sum_{A \in \mathcal{V}_h} |A| + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} |K| = d|\Omega|.$$

Par rapport au cas 2D, les produits scalaires discrets doivent donc être modifiés :

$$(u, v)_{\mathbf{U}_h} = \frac{1}{d} \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} u_K v_K |K| + \sum_{A \in \mathcal{V}_h} u_A v_A |A| \right),$$

$$(\mathbf{p}, \mathbf{q})_{\mathbf{Q}_h} = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{e \in \mathcal{E}_K} \mathbf{p}_{K,e} \cdot \mathbf{q}_{K,e} |D_{K,e}|,$$

respectivement dans l'espace $\mathbf{U}_h = \{(u_K)_{K \in \mathcal{T}_h}, (u_A)_{A \in \mathcal{V}_h}\}$ des degrés de libertés (1 par volume de contrôle et 1 par sommet) et dans l'espace $\mathbf{Q}_h = \{(\mathbf{p}_{K,e})_{e \in \mathcal{E}_K, K \in \mathcal{T}_h}\}$ des gradients. Les gradients sont notés $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_{K,e})$ où $\mathbf{p}_{K,e}$ est le gradient dans la demie-cellule diamant $K \cap D_e$, pour pouvoir tenir compte d'une discontinuité des coefficients. On impose alors une relation de continuité des flux (ou conservativité) pour relier localement $\mathbf{p}_{K,e}$ et $\mathbf{p}_{L,e}$, pour $e = \bar{K} \cap \bar{L}$: on note $\mathbf{Q}_h^{(C)}$ le sous espace de \mathbf{Q}_h des gradients tels que

$$G_{K,e} \mathbf{p}_{K,e} \cdot \mathbf{n}_e = G_{L,e} \mathbf{p}_{L,e} \cdot \mathbf{n}_e, \quad (2.20)$$

où $(G_{K,e})_{e \in \mathcal{E}_K, K \in \mathcal{T}_h}$ est une discrétisation dans $K \cap \mathcal{D}_e$ de la matrice de diffusion $G(x)$. Le gradient de $u = \{(u_K), (u_A)\} \in \mathbf{U}_h$ est un vecteur de $\mathbf{Q}_h^{(C)}$ calculé avec la formule du schéma diamant et une inconnue auxiliaire u_e dans chaque $D_{K,e}$. L'inconnue auxiliaire est aisément éliminée de la formulation grâce à (2.20). Dans le cas $G_{K,e} = G_{L,e}$ on retrouve la formule habituelle du schéma diamant, $\nabla_e u = \nabla_{K,e} u = \nabla_{L,e} u$,

$$\nabla_e u = \frac{1}{3} \frac{1}{|D_e|} ((u_K - u_L) \mathbf{N}_{KL} + (u_B - u_C) \mathbf{N}_A + (u_C - u_A) \mathbf{N}_B + (u_A - u_B) \mathbf{N}_C), \quad (2.21)$$

où $\mathbf{N}_{KL} = \frac{1}{2}(x_B - x_A) \wedge (x_C - x_A)$, $\mathbf{N}_A = \frac{1}{2}(x_e - x_A) \wedge (x_K - x_L)$, $\mathbf{N}_B = \frac{1}{2}(x_e - x_B) \wedge (x_K - x_L)$, $\mathbf{N}_C = \frac{1}{2}(x_e - x_C) \wedge (x_K - x_L)$ pour $e = \bar{K} \cap \bar{L}$ une interface de sommets x_A, x_B, x_C orientés de telle sorte que $6|D_e| = \det(x_B - x_A, x_C - x_A, x_K - x_L) > 0$.

Remarque 2.8 On voit que le schéma peut prendre en compte les conditions aux limites de Neumann ($G_{K,e} \mathbf{p}_{K,e} \cdot \mathbf{n}_{K,e} = 0$ défini l'inconnue auxiliaire u_e) ou de Dirichlet (imposer $u_A = 0$ si $x_A \in \partial\Omega$ et $u_e = 0$ pour $e \subset \partial\Omega$).

Nous avons démontré le théorème suivant d'intégration par partie discrète.

Théorème 2.9 Étant donné $(G_{K,e})_{e \in \mathcal{E}_K, K \in \mathcal{T}_h}$, pour tout $u \in \mathbf{U}_h$ et $\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_h^{(C)}$, on a

$$(\operatorname{div}_h \mathbf{q}, u)_{\mathbf{U}_h} + (\mathbf{q}, \nabla_h u)_{\mathbf{Q}_h} = \langle \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}, \gamma_0(u) \rangle_{\partial\Omega, h} \quad (2.22)$$

Dans le théorème 2.9, la trace est définie par

$$\langle \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}, \gamma_0(u) \rangle_{\partial\Omega, h} = \sum_{e \subset \partial\Omega} (\mathbf{q}_e \cdot \mathbf{N}_e) \frac{1}{d} \left(u_e + (d-1) \sum_{x_A \in e} \frac{u_A}{d} \right)$$

(u_e est donné par les conditions aux limites, voir remarque 2.8) et la divergence de $\mathbf{q} \in \mathbf{Q}_h^{(C)}$ est définie dans \mathbf{U}_h par $\operatorname{div}_h \mathbf{q} = \{(\operatorname{div}_K \mathbf{q})_K, (\operatorname{div}_A \mathbf{q})_A\}$ avec

$$\operatorname{div}_K \mathbf{q} = \frac{1}{|K|} \sum_{e \in \mathcal{E}_K} G_{K,e} \mathbf{q}_{K,e} \cdot \mathbf{N}_e, \quad (2.23)$$

$$\operatorname{div}_A \mathbf{q} = \frac{1}{|A|} \sum_{D_e \in \mathcal{D}_A} (G_{K,e} \mathbf{q}_{K,e} \cdot \mathbf{N}_{A,K} + G_{L,e} \mathbf{q}_{L,e} \cdot \mathbf{N}_{A,L}). \quad (2.24)$$

Les sommes ont lieu sur toutes les cellules diamants dont x_K (resp. x_A) est un sommet. Les normales \mathbf{N} sont définies *avec leurs surfaces*, $\mathbf{N}_e = \mathbf{N}_{KL} = \frac{1}{2}(x_B - x_A) \wedge (x_C - x_A)$, $\mathbf{N}_{A,L} = \frac{1}{2}(x_e - x_B) \wedge (x_e - x_L) - \frac{1}{2}(x_e - x_C) \wedge (x_e - x_L)$, $\mathbf{N}_{A,K} = \frac{1}{2}(x_e - x_B) \wedge (x_K - x_e) - \frac{1}{2}(x_e - x_C) \wedge (x_K - x_e)$ ³.

Une conséquence pratique immédiate de (2.22) est que la méthode DDFV-3D à 2 maillages conserve la symétrie du problème. pour des conditions aux limites mêlées, Dirichlet et Neumann, on obtient un système linéaire dans l'espace des degré de libertés non Dirichlet $\mathbf{U}_h^0 = \{u \in \mathbf{U}_h, u_A \text{ donné si } x_A \in \partial\Omega\}$,

$$A_h u_h = f_h + g_h,$$

où A_h est une matrice symétrique et définie positive, $f_h = \{(f_K)_K, (f_A)_A\} \in \mathbf{U}_h^0$ et g_h est la contribution des conditions aux limites ($g_h = 0$ pour le problème homogène). C'est ce résultat qui est utilisé pour résoudre le problème bidomaine en électrocardiologie (section 1.3, [21, 17, 1]).

Il est moins immédiat mais néanmoins possible d'obtenir un résultat de convergence dans le cas d'une solution exacte $u \in H^1(\Omega)$ et une estimation d'erreur dans le cas $u \in H^2(\Omega)$. Il suffit de suivre la démarche de [65] ou de [38] en utilisant le théorème 2.9. Il faut pour cela démontrer la consistance des gradients (2.21), qui sont exacts pour des fonctions affines, et d'utiliser une inégalité de Poincaré discrète.

2.2.2 Analyse numérique d'une méthode à 3 maillages en 3D

Bien que cette méthode soit très robuste et intéressante en pratique, elle ne s'écrit que sur des maillages dont les interfaces sont des triangles ou bien des quadrilatères, d'une part, et utilise un maillage secondaire ayant des volumes de contrôle non disjoint 2 à 2, d'autre part. Elle n'apparaît pas comme une généralisation de la technique 2D.

Pourtant une telle généralisation est possible : puisqu'il faut 3 dérivées partielles dans des directions indépendantes pour avoir un gradient en 3D, il suffit de disposer de 3 maillages volumes finis dont les interfaces se regroupent 3 par 3 pour former les *cellules diamants* dans lesquelles les 3 différences divisées (suivant les 3 maillages) donnent une formule consistante pour le calcul d'un gradient discret. Puis, on calcule les flux à travers les interfaces de chacun des 3 maillages en ajoutant les contributions des cellules diamants.

En dimension $d \geq 2$, on obtient un schéma qui généralise le schéma DDFV 2D classique. Ce schéma utilise d maillages volumes finis. La cellule diamant, sur laquelle est calculée le gradient, possède $2d$ sommets (4 en 2D, 6 en 3D). Voir [15, 30] pour une présentation détaillée du schéma. Pour un maillage assez régulier, les cellules diamants sont des d -parallélotopes. On peut donc se représenter ce schéma comme un schéma aux différences finies (seulement faiblement consistant) conservatif et compact, et valable sur maillage non structurés.

Partant d'un maillage volumes finis donné \mathcal{T}_h d'un domaine de calcul Ω en polygones quelconques, il faut donc construire $d - 1$ maillages volumes finis supplémentaires et un maillage spécifique dit « diamant », noté \mathcal{D}_h dont les cellules D sont des polygones à $2d$ sommets (x_1, \dots, x_{2d}) rangés par couples $(x_{2i-1}, x_{2i})_{i=1\dots d}$ de centres des volumes de contrôle des d maillages volumes finis.

En 2D, un maillage contient des éléments de dimensions 0 (les noeuds), 1 (les arêtes) et 2 (les cellules). Le 2e maillage est le dual du maillage des cellules, construit autour

³notons que $\mathbf{N}_{A,K} + \mathbf{N}_{A,L} = \mathbf{N}_B - \mathbf{N}_C$

des noeuds, et le maillage diamant est construit autour des arêtes puisqu'à chaque arête on peut associer 2 sommets et 2 cellules. Si l'on considère la relation « est au bord de » noté \prec définie sur l'ensemble des polygones du maillages (de dimensions 0 à d), pour chaque face e il existe exactement 2 sommets x_i et deux volumes de contrôle K_i tel que $x_i \prec e \prec K_i$. C'est cette propriété qui permet de définir les mailles diamants.

En 3D, un maillage contient des polygones de dimensions 0 (noeuds), 1 (arêtes), 2 (faces) et 3 (cellules). La construction précédente n'est plus valable, mais pour chaque couple $e \prec f$ (arête e d'une face f), il existe exactement 2 sommets x_i et deux volumes de contrôle K_i tel que $x_i \prec e \prec f \prec K_i$. C'est donc les couples $e \prec f$ qui définissent les cellules diamants, dont les 6 sommets sont les x_i , les centres des K_i et les centres de l'arête e et de la face f :

- le premier maillage est \mathcal{T}_h constitué des cellules du maillage de départ,
- le second maillage noté \mathcal{V}_h est encore constitué d'un volume de contrôle par sommet x_A ,
- le troisième maillage noté \mathcal{S}_h est constitué d'un volume de contrôle par arête e ou par face f .

Les cellules diamants sont donc définies par

$$\mathcal{D}_h = \bigcup_{e \prec f} \{D(x_e, x_f, x_K, x_L, x_A, x_B), x_A, x_B \prec e \prec f \prec K, L\}.$$

Une cellule diamant est définie par un couple (e, f) tel que $e \prec f$. On la note $D_{e,f}$ et on note $x_A, x_B, x_K, x_L, x_e, x_f$ ses sommets. Dans cette cellule diamant on doit définir 3 interfaces entre les couples de volumes de contrôle des 3 maillages (figure 2.2.2) :

- l'interface du premier maillage \mathcal{T}_h , entre les cellules K et L , est simplement le quadrilatère de sommets x_A, x_B, x_e, x_f (dans le plan de la face f , en bleu sur la figure 2.2.2),
- l'interface du second maillage \mathcal{V}_h , entre les cellules de centres x_A et x_B , est constituée des deux triangles x_K, x_e, x_f et x_L, x_e, x_f (en vert sur la figure 2.2.2),
- l'interface du troisième maillage \mathcal{S}_h , entre les cellules de centres x_e et x_f , est constituée de 4 triangles, (x_D, x_A, x_K) , (x_D, x_A, x_L) , (x_D, x_B, x_K) , (x_D, x_B, x_L) , où x_D est le milieu du segment (x_e, x_f) (en rouge sur la figure 2.2.2).

Les trois maillages \mathcal{T}_h , \mathcal{V}_h et \mathcal{S}_h sont des partitions de Ω en volumes de contrôle d'intérieurs 2 à 2 disjoints, $\sum_{K \in \mathcal{T}_h} |K| + \sum_{A \in \mathcal{V}_h} |A| + \sum_{S \in \mathcal{S}_h} |S| = 3|\Omega|$. Les espaces discrets de l'inconnue et de son gradient sont donc $\mathbf{U}_h = \{(u_K)_{K \in \mathcal{T}_h}, (u_A)_{A \in \mathcal{V}_h}, (u_S)_{S \in \mathcal{S}_h}\}$ et $\mathbf{Q}_h = \{(\mathbf{p}_{ef})_{e \prec f}\}$, et les produits scalaires deviennent

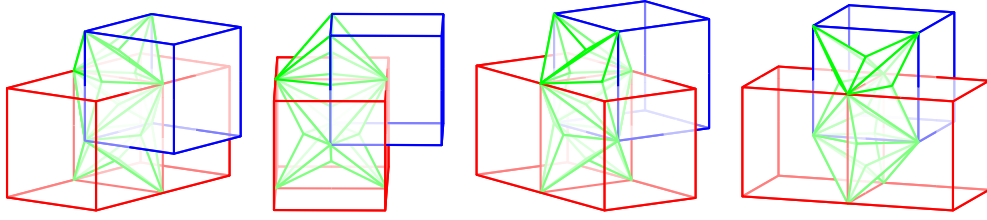
$$(u, v)_{\mathbf{U}_h} = \frac{1}{3} \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} u_K v_K |K| + \sum_{A \in \mathcal{V}_h} u_A v_A |A| + \sum_{S \in \mathcal{S}_h} u_S v_S |S| \right),$$

$$(\mathbf{p}, \mathbf{q})_{\mathbf{Q}_h} = \sum_{e \prec f} \mathbf{p}_{ef} \cdot \mathbf{q}_{ef} |D_{ef}|.$$

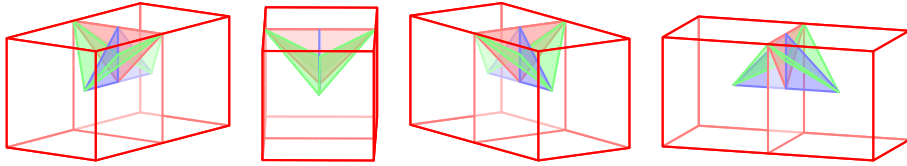
On a considéré ici le cas de coefficients continus : il n'est pas nécessaire de construire 2 gradients, des côtés K et L de D_{ef} . Dans ce cas, $G_{K,ef} = G_{L,ef}$ est l'approximation de la diffusion dans D_{ef} et le gradient est donnée par une formule simple,

$$\nabla_{ef} u = \frac{1}{3} \frac{1}{|D_{ef}|} ((u_K - u_L) \mathbf{N}_{KL} + (u_f - u_e) \mathbf{N}_{ef} + (u_B - u_A) \mathbf{N}_{AB}), \quad (2.25)$$

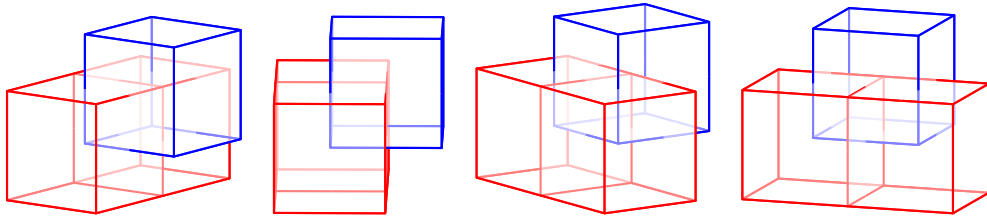
avec pour $(X, Y) = (K, L)$, (A, B) , ou bien (e, f) , la notation $\mathbf{N}_{XY} = \int_{X \cap Y \cap D_{ef}} \mathbf{n}_{XY}$ où \mathbf{n}_{XY} est la normale à l'interface $X \cap Y$ unitaire et dirigée de X vers Y . Cette normale es



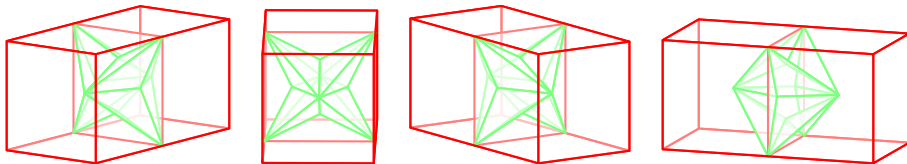
(a) Les 3 maillages superposés



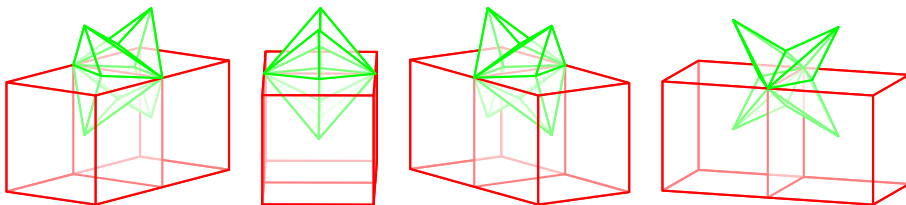
(b) Une maille diamant D et les interfaces qu'elle contient



(c) Maillage principale et une maille associé à un noeud (maillage \mathcal{V}_h)



(d) Maillage principale et une maille associée à une face (maillage \mathcal{S}_h)



(e) Maillage principale et une maille associée à une arête (maillage \mathcal{S}_h)

FIG. 2.6 – Vues 3D des maillages associés à une grille cartésienne.

calcule en pratique en faisant des produits vectoriels. On suppose de plus que $6|D_{ef}| = \det(x_L - x_K, x_B - x_A, x_f - x_e) > 0$.

Alors, dans le cas homogène, le théorème 2.9 (formule de Green discrète) est encore vrai avec les produits scalaires ci-dessus et la divergence définie de \mathbf{Q}_h dans \mathbf{U}_h par $\text{div}_h \mathbf{q} = \{(\text{div}_K \mathbf{q})_K, (\text{div}_A \mathbf{q})_A, (\text{div}_S \mathbf{q})_S\}$ où chacune des divergences est définie comme en (2.23)-(2.24).

Dans [15, 30] nous démontrons la convergence de ce schéma et calculons des estimations d'erreurs semblables à celles obtenues en 2D. Puisque l'égalité (2.22) (intégration par partie) à lieu, il suffit de vérifier la consistance du gradient (2.25) et de démontrer une inégalité de Poincaré. Ces résultats ne posent que des problèmes techniques, et reposent sur une propriété de régularité des maillages qui fait intervenir la matrice de Gram de $(\mathbf{N}_{KL}, \mathbf{N}_{ef}, \mathbf{N}_{AB})$

$$\mathbb{G}_{ef} = \begin{pmatrix} \mathbf{N}_{KL} \cdot G_{ef} \mathbf{N}_{KL} & \mathbf{N}_{KL} \cdot G_{ef} \mathbf{N}_{ef} & \mathbf{N}_{KL} \cdot G_{ef} \mathbf{N}_{AB} \\ \mathbf{N}_{KL} \cdot G_{ef} \mathbf{N}_{ef} & \mathbf{N}_{ef} \cdot G_{ef} \mathbf{N}_{ef} & \mathbf{N}_{ef} \cdot G_{ef} \mathbf{N}_{AB} \\ \mathbf{N}_{KL} \cdot G_{ef} \mathbf{N}_{AB} & \mathbf{N}_{ef} \cdot G_{ef} \mathbf{N}_{AB} & \mathbf{N}_{AB} \cdot G_{ef} \mathbf{N}_{AB} \end{pmatrix}.$$

En effet, le gradient discret vérifie

$$\|\mathbf{p}\|_{\mathbf{Q}_h}^2 = \sum_{D_{ef} \in \mathcal{D}_h} \frac{1}{9|D_{ef}|^2} \delta \mathbf{p}_{ef}^T \mathbb{G}_{ef} \delta \mathbf{p}_{ef}$$

où

$$\delta \mathbf{p}_{ef} = (\mathbf{p}_L - \mathbf{p}_K \quad \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_e \quad \mathbf{p}_B - \mathbf{p}_A)^T.$$

Ainsi, le résultat de convergence de [15, 30] est vrai sous une hypothèse géométrique de non dégénérescence des cellules diamants qui revient à supposer que

$$\underline{g} \mathbf{I}_{\mathbb{R}^3} \leq \mathbb{G}_{ef} \leq \bar{g} \mathbf{I}_{\mathbb{R}^3}$$

où \underline{g} et \bar{g} ne dépendent pas du maillage.

2.2.3 Convergence du schéma DDFV en 2D pour l'équation de convection-diffusion linéaire

La méthode DDFV en 2D donne une très bonne approximation du gradient de la solution [77]. Par ailleurs il est précis à l'ordre 2 (expérimentalement) pour un problème de diffusion pure [59]. Il est donc naturel d'essayer de l'utiliser pour construire un schéma d'ordre 2 pour un problème de convection-diffusion.

C'est ce que nous proposons dans un travail récent avec G. Manzini [2]. Rappelons que cette méthode est basée sur la combinaison de 2 schémas volumes finis (maillages primal et maillage dual autour des noeuds). Pour approcher correctement la solution de l'équation

$$\text{div}(bu - G\nabla u) = f \quad \text{dans } \Omega, \quad u = g \quad \text{sur } \partial\Omega$$

($\text{div}(b) \geq 0$ et G un tenseur de diffusion symétrique et uniformément elliptique), il faut

- utiliser un schéma décentré pour le flux de convection,
- construire des approximations consistantes des flux de diffusion.

Pour obtenir un schéma d'ordre élevé, nous utilisons un schéma décentré amont avec une reconstruction affine par morceaux de la solution approchée, basée sur une reconstruction originale des gradients par cellule. Nous proposons une reconstruction linéaire du gradient

à partir des gradients DDFV dans les diamants : pour $K \in \mathcal{T}_h$ et $A \in \mathcal{V}_h$ on a donc des gradients $\nabla_K u$ et $\nabla_A u$ de la forme

$$\nabla_K u = \sum_{e \in \partial K} \alpha_{K\mathcal{D}_{ef}} \nabla_{\mathcal{D}_{ef}} u, \quad \nabla_A u = \sum_{f \in \partial A} \alpha_{A\mathcal{D}_{ef}} \nabla_{\mathcal{D}_{ef}} u$$

où les (α_{KD}) et (α_{AD}) sont deux matrices de coefficients réels. La reconstruction affine dans les $K \in \mathcal{T}_h$ et dans les $A \in \mathcal{V}_h$ est donc

$$u_K(x) = u_K + \nabla_K u \cdot (x - x_K), \quad u_A(x) = u_A + \nabla_A u \cdot (x - x_A). \quad (2.26)$$

Nous démontrons dans [2] la convergence des schémas construits de cette manière et une estimation d'erreur, sous une hypothèse de consistance pour les poids (α_{KD}) et (α_{AD}) .

Théorème 2.10 (Convergence et estimations d'erreur) *Sur une famille $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ de maillages telle que les maillages en cellules diamants soient non dégénérés, la solution approchée tend vers la solution exacte et on a*

$$\|\nabla_h(\pi_h u - u_h)\|_{\mathbf{Q}_h} \leq Ch \|u\|_{H^2(\Omega)}$$

pour $0 < h < h_0$, où $\pi_h u$ est une projection de la solution exacte $u \in H^2$, et d'autre part

$$\|u - \hat{u}_h\|_{L^2(\Omega)} + \|\nabla u - \nabla_h u_h\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch \|u\|_{H^2(\Omega)}$$

où \hat{u} est la moyenne des deux fonctions constantes par morceaux sur les volumes de contrôle des 2 maillages (primal et dual).

De plus si les cellules diamants sont des parallélogrammes, alors on obtient une estimation d'erreur en $h^{3/2}$ pour $\|\nabla_h(\pi_h u - u_h)\|_{\mathbf{Q}_h}$.

Pour cela, le premier point clé est de démontrer que la modification apportée par la reconstruction (2.26) est en $O(h)$. Ainsi, le terme discret de convection reste dissipatif : il ne modifie pas la coercivité du schéma, venant du terme de diffusion.

Un second point clé de notre démonstration est l'utilisation d'estimations de consistance pour l'approximation des flux de convection et de diffusion. Classiquement, l'analyse numérique des schémas volumes finis requiert des calculs fastidieux à partir de développement de Taylor avec reste intégral [60]. En effet il semble impossible d'utiliser la démarche habituelle (en interpolation sur maillages éléments finis) de mise à l'échelle par rapport à un élément de référence : la géométrie des cellules est très générale, et il n'existe pas d'élément de référence pour une famille de maillages.

Néanmoins, dans [2], nous proposons de contourner cette difficulté grâce à une présentation nouvelle de l'étude des flux numériques volumes finis. De cette manière, nous pouvons utiliser des résultats d'interpolations classiques (voir par exemple [45]) pour démontrer des estimations d'erreurs. La preuve repose sur l'idée que les cellules diamants en 2D sont tous des quadrangles, et que leurs subdivisions suivant une diagonale construisent un maillage de triangles. L'obtention d'estimation d'erreur en h^s pour une solution $H^{1+s}(\Omega)$ ($s > 0$) obtenues dans [60] peuvent être obtenues de cette manière.

Des résultats numériques illustrent l'efficacité du schéma et la pertinence de notre analyse. On étudie en particulier l'influence de la forme des mailles diamants (parallélogrammes ou non) sur l'ordre de convergence.

2.3 Convergence d'un schéma volumes finis pour des systèmes hyperboliques linéaires symétriques en domaines bornés

Les systèmes hyperboliques linéaires symétriques (acoustiques, équations, de Maxwell, etc) sont de la forme

$$\partial_t u + \sum_{i=1}^d A_i \partial_i u = 0, \quad \begin{cases} (A\mathbf{n} - M)u = 0 & ((0, T) \times \Omega) \\ u(0, \cdot) = u_0 & \Omega \end{cases} \quad (2.27)$$

dans un domaine borné Ω et pour $t \in (0, T)$; les matrices A_i sont symétriques de tailles $m \times m$ ($m > 0$) et la matrice M est de taille $m \times m$, définie sur $\partial\Omega$ et telle que $M + M^T \geq 0$ et $\ker(A\mathbf{n} - M) + \ker(A\mathbf{n} + M) = \mathbb{R}^m$. Pour des données assez régulières, ce problème admet une solution unique $u \in C^0([0, T]; H^1(\Omega)) \cap C^1(0, T; L^2(\Omega))$.

Pour écrire une discrétisation *explicite en temps* de ce système sur un maillage non structuré, la méthode des volumes finis est une bonne solution, comme cela est démontré dans [107]. Le travail exposé dans [7] propose d'étendre l'approche de [107] au cas du problème aux limites. Le schéma proposé à donc comme inconnue une fonction constante par morceaux sur un maillage \mathcal{T}_h en volumes de contrôle K^4 à chaque instant $t^n = n\Delta t$ ($\Delta t > 0$), qui vérifie

$$u_K^{n+1} = u_K^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_{e \in \mathcal{E}_K} g_{K,e}^n |e|.$$

On utilise le flux d'ordre 1 décentré amont classiquement obtenu en décomposant $An = \sum_{i=1}^d A_i n_i$ en parties positive et négative, $An^+ + An^-$; où $n = (n_1, \dots, n_d) \in \mathbb{R}^n$ est un vecteur. À travers une interface e entre deux cellules K et L , et avec $n = n_{KL}$ on a donc

$$g_{K,e}^n = An_{KL}^+ u_K^n + An_{KL}^- u_L^n.$$

Dans [107] ce décentrement suffit pour introduire une dissipation d'énergie qui permet de contrôler la solution discrète, et donc de démontrer la convergence et de calculer des estimations d'erreurs.

L'objectif principal de ce travail était de discrétiser les termes de bord dans ce cadre (explicite en temps) de manière dissipative. Pour cela, je propose un terme de correction dissipative de la discrétisation au bord. Si e est une arête de K du bord de Ω , on utilisera le flux

$$g_{K,e}^n = \left(\frac{1}{2}(An_{K,e} + M) + Q_e \right) u_K^n$$

alors que $g_{K,e}^n = \frac{1}{2}(An_{K,e} + M)u_K^n$ est le flux qui apparaît le plus naturellement. La condition $\ker(An_{K,e} - M) \subset \ker(Q_e)$ assure alors la consistance du schéma. Le terme $Q_e u_K^n$ est construit pour introduire un terme de dissipation numérique dans les termes de bord de l'estimation d'énergie, en tenant compte de la condition $\ker(A\mathbf{n} - M) + \ker(A\mathbf{n} + M) = \mathbb{R}^m$ [7, 37].

Grâce à ce terme dissipatif, on peut faire aboutir les estimations déjà développées dans [107] et obtenir le thm 2.11.

⁴notations de la section 2.1

Théorème 2.11 (Convergence du schéma) Soit $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ une famille de maillage régulière, soit $T > 0$ et $\epsilon > 0$. Sous la condition CFL

$$\forall K \in \mathcal{T}_h, \forall e \in \mathcal{E}_K, \quad \begin{cases} \|An_{K,e}^-\| \frac{|\partial K|}{|K|} \Delta t \leq 1 - \epsilon & (e \in \mathcal{E}_h^i) \\ \|\frac{1}{2} \left(\frac{M+M^T}{2} - An_{K,e} \right) \| \Delta t \leq 1 - \epsilon & (e \in \mathcal{E}_h^b) \end{cases}$$

on a

$$\|u - u_h\|_{L^2((0,T) \times \Omega)} \leq ch^{1/2}, \quad \int_{(0,T) \times \Omega} (P_h u_h)^T (M - An)(P_h u_h) \leq ch^{1/2},$$

une estimation H^1 discrète uniforme et une estimation sur le module de continuité en temps (voir [7]).

Remarque 2.9 La deuxième partie du résultat montre que la solution vérifie la condition aux limites asymptotiquement. Les estimations d'erreurs sont les mêmes que pour les schémas éléments finis d'ordre 0.

Travaux de l'auteur

Publications dans des revues à comité de lecture

- [1] Y. Coudière, C. Pierre, and R. Turpault. A 2D/3D discrete duality finite volume scheme. Application to ecg simulation. *International Journal on Finite Volumes*, 6(1), 2009.
- [2] Y. Coudière and M. Manzini. The discrete duality finite volume method for convection-diffusion problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis (accepted for publication)*, 2009.
- [3] Y. Bourgault, Y. Coudière, and C. Pierre. Existence and uniqueness of the solution for the bidomain model used in cardiac electrophysiology. *Nonlinear Anal. Real World Appl.*, 10(1) :458–482, 2009. DOI :doi :10.1016/j.nonrwa.2007.10.007.
- [4] Y. Coudière and C. Pierre. Stability and convergence of a finite volume method for two systems of reaction-diffusion equations in electro-cardiology. *Nonlinear Anal. Real World Appl.*, 7(4) :916–935, 2006.
- [5] A. Dervieux, D. Leservoisier, P.-L. George, and Y. Coudière. About theoretical and practical impact of mesh adaptation on approximation of functions and PDE solutions. *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, 43(5) :507–516, 2003.
- [6] Y. Coudière, T. Gallouët, and R. Herbin. Discrete Sobolev inequalities and L^p error estimates for finite volume solutions of convection diffusion equations. *Math. Model. Numer. Anal.*, 35(4) :767–778, 2001.
- [7] Y. Coudière, J.-P. Vila, and P. Villedieu. Convergence d'un schéma volumes finis explicite en temps pour les systèmes hyperboliques linéaires symétriques en domaines bornés (convergence of a finite volume time-explicit scheme for symmetric linear hyperbolic systems on bounded domains). *C.R. Acad. Sci., Paris, Sér. I, Math.*, 331 :95–100, 2000.
- [8] Y. Coudière and P. Villedieu. Convergence of a finite volume scheme for the linear convection-diffusion equation on locally refined meshes. *Math. Model. Numer. Anal.*, 34(6) :1109–1295, 2000.
- [9] Y. Coudière, J.-P. Vila, and P. Villedieu. Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional diffusion convection problem. *Math. Model. Numer. Anal.*, 33(3) :493–516, 1999.

Articles de conférences dans le domaine de l'imagerie médicale

- [10] Sermesant M., Konukoglu E., Delingette H., Coudière Y., Chinchapatnam P., Rhode K.S., Razavi R., and Ayache N. An anisotropic multi-front fast marching method for

- real-time simulation of cardiac electrophysiology. *Functional imaging and modeling of the heart. 4th international conference*, number 4466 in Lect. Notes Comput. Sci.. Springer, 2007.
- [11] M. Sermesant, Y. Coudiere, V. Moreau-Villeger, K.S. Rhode, D.L. Hill, and R.S. Razavi. A fast-marching approach to cardiac electrophysiology simulation for xmr interventional imaging. *Medical image computing and computer-assisted intervention - MICCAI 2005. 8th international conference*, number 3750 in Lect. Notes Comput. Sci. Springer, 2005.
 - [12] M. Sermesant, O. Faris, F. Evans, E. McVeigh, Y. Coudière, H. Delingette, and N. Ayache. Preliminary validation using in vivo measures of a macroscopic electrical model of the heart. In *International Symposium on Surgery Simulation and Soft Tissue Modeling - IS4TM'03*, Lect. Notes Comput. Sci., pages 230–243. Springer, 2003.
 - [13] M. Sermesant, Y. Coudière, H. Delingette, N. Ayache, and J.A. Désidéri. An electro-mechanical model of the heart for cardiac image analysis. In W. J. Niessen and M. A. Viergever, editors, *Medical image computing and computer-assisted intervention - MICCAI 2001. 4th international conference*, number 2208 in Lect. Notes Comput. Sci., pages 224–231. Springer, 2001.
 - [14] N. Ayache, D. Chapelle, F. Clément, Y. Coudière, H. Delingette, J.A. Désidéri, M. Sermesant, M. Sorine, and José M. Urquiza. Towards model-based estimation of the cardiac electro-mechanical activity from ecg signals and ultrasound images. In T. Katila, I.E. Magnin, P. Clarysse, J. Montagnat, and J. Nenonen, editors, *Functional imaging and modeling of the heart. 1st international workshop*, number 2230 in Lect. Notes Comput. Sci., pages 120–127. Springer, 2001.

Actes de conférences internationales

- [15] Y. Coudière and F. Hubert. A 3D discrete duality finite volume method for nonlinear elliptic equations. In *Algoritmy, Conference on Scientific Computing*, Slovakia, 2009. <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00356879/fr>.
- [16] Y. Coudière, C. Pierre, and R. Turpault. A 2D/3D finite volume method used to solve the bidomain equations of electrocardiology. In *Algoritmy, Conference on Scientific Computing*, Slovakia, 2009. <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00357267/fr>.
- [17] Y. Coudière, C. Pierre, and R. Turpault. A DDFV scheme for anisotropic and heterogeneous elliptic equations, application to a bio-mathematics problem : electrocardiogram simulation. 5th Conference on Finite volumes for complex applications, Problems and perspectives, 2008.
- [18] M. Pop, M. Sermesant, Y. Coudière, J. Graham, M. Bronskill, A. Dick, and G. Wright. A theoretical model of ventricular reentry and its radiofrequency ablation therapy. In *2006 IEEE International Symposium on biomedical Imaging*, 2006.
- [19] M. Pop, M. Sermesant, A. Dick, Graham J.J., Y. Coudière, and G.A. Wright. Aid of computer modelling to identify ventricular re-entries due to infarct scars. In *15th World Congress in Cardiac Electrophysiology and Cardiac Techniques*, volume 8. Europace, 2006. Supplement 1.

- [20] M. Pop, M. Sermesant, Graham J.J., A. Dick, Y. Coudière, and G.A. Wright. Assessment of radiofrequency ablation of ventricular arrhythmias via magnetic resonance imaging and computer modelling. In *15th World Congress in Cardiac Electrophysiology and Cardiac Techniques*, volume 8. Europace, 2006. Supplement 1.
- [21] Y. Coudière, C. Pierre, and R. Turpault. A finite volume method for the coupled heart-torso bidomain model in electrocardiology. In *Computational Fluid and Solid Mechanics*, 3rd MIT conference, 2005.
- [22] Y. Coudière, C. Pierre, and R. Turpault. Stability and convergence of a finite volume method for a reaction-diffusion system of equations in electro-cardiology. In *Finite volumes for complex applications IV. Problems and perspectives. Papers from the 4th international conference*, pages 163–172, Hermès, 2005.
- [23] M. Sermesant, Y. Coudière, H. Delingette, and N. Ayache. Progress towards an electromechanical model of the heart for cardiac image analysis. In *IEEE International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI'02)*, 2002.
- [24] M. Sermesant, Y. Coudière, H. Delingette, N. Ayache, J. Sainte-Marie, D. Chapelle, F. Clément, and M. Sorine. Progress towards model-based estimation of the cardiac electromechanical activity from ecg signals and 4d images. *ESAIM, Proc.*, 12 :153–161, 2002.
- [25] Y. Coudière, J.P. Vila, and P. Villedieu. Convergence of the finite volumes method for friedrichs' systems on bounded domains. In *on nonlinear partial differential equations*, Besançon (France), 1999. International Conference in memory of S.N. Kruskov.
- [26] Y. Coudière and P. Villedieu. Cell centered finite volume schemes for convection-diffusion problems. In *Abstracts of the Invited Lectures at the Seventh International Colloquium on Numerical Analysis*, pages 233–240, Plovdiv, Bulgaria, August 1998.
- [27] Y. Coudière and P. Villedieu. Convergence rate of the finite volume time-explicit upwind scheme for the maxwell system on a bounded domain. In F. Benkhaldoun and R. Vilsmeier, editors, *Finite volumes for complex applications II. Problems and perspectives. Papers from the 2nd international conference*, pages 125–132. Hermès, 1999.
- [28] Y. Coudière, J.P. Vila, and P. Villedieu. Convergence of a finite volume scheme for a diffusion convection problem. In F. Benkhaldoun and R. Vilsmeier, editors, *Finite Volumes for Complex Applications*, pages 161–168. Hermès, 1996.

Autres travaux

- [29] Y. Bourgault and Y. Coudière and M. Rioux. Optimal monodomain approximations of the bidomain equations for the isolated heart. In preparation, 2009.
- [30] Y. Coudière and F. Hubert. Error estimates for a 3D extension of the Discrete Duality Finite Volume scheme for nonlinear elliptic equations. In preparation, 2009.
- [31] Y. Coudière and R. Turpault. Modèles et Méthodes Mathématiques en Électrocardiologie. MATAPLI, 2008.
- [32] Y. Coudière. Un schéma volumes finis en dualité discrète 3D, application au système bidomaine de l'électrocardiologie. Journées du GDR MOMAS - VF06 : anisotropie à Porquerolles, 2006.

- [33] Y. Coudière, C. Pierre, and R. Turpault. Solving the fully coupled heart and torso problems of electrocardiology with a 3D discrete duality finite volume method. 2006. <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00016825>.
- [34] Y. Coudière and C. Pierre. Finite volume approximation of the FitzHugh-Nagumo equations. Écoles CEA-EDF-INRIA - Electromechanical behaviour of the heart : confronting models with data towards medical applications, 2004.
- [35] Y. Coudière, B. Palmerio, A. Dervieux, and D. Leservoisier. Accuracy barriers in mesh adaptation. Technical report, INRIA Sophia Antipolis - SMASH, 2002. <http://hal.inria.fr/inria-00072060/fr>.
- [36] Oniboni J. Modélisation et simulation numérique de l'influx cardiaque (modeling and numerical simulation of electric wave propagation in heart). Technical report, INRIA, 2001.
- [37] Y. Coudière. *Analyse de schémas volumes finis sur maillages non structurés pour des problèmes linéaires hyperboliques et elliptiques*. PhD thesis, Université Paul Sabatier, 12 janvier 1999.

Références

- [37] R. Aliev and A. Panfilov. A simple two-variable model of cardiac excitation. *Chaos, Solitons and Fractals*, 3(7) :293–301, 1996.
- [38] B. Andreianov, F. Boyer, and F. Hubert. Discrete duality finite volume schemes for Leray-Lions-type elliptic problems on general 2d meshes. *Num. Meth. for PDEs*, 23(1) :145–195, 2007. <http://dx.doi.org/10.1002/num.20170>.
- [39] S.B. Baden, N.P. Chrisochoides, D.B. Gannon, and M.L. Norman, editors. *Structured Adaptive Mesh Refinement (SAMR) Grid Methods*, volume 117 of *IMA Volumes in Mathematics and its Applications*. Springer, 2000.
- [40] M. Bendahmane and K. H. Karlsen. Analysis of a class of degenerate reaction-diffusion systems and the bidomain model of cardiac tissue. *Netw. Heterog. Media*, 1(1) :185–218 (electronic), 2006.
- [41] M. J. Berger and P. Collela. Local adaptative mesh refinement for shock hydrodynamics. *Journal Of Computational Physics*, 82 :64–84, 1989.
- [42] E. Bertolazzi and G. Manzini. A second-order maximum principle preserving finite volume method for steady convection-diffusion problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 43, 2005.
- [43] M. Boulakia, M.A. Fernandez, J.-F. Gerbeau, and N. Zemzemi. A coupled system of pdes and odes arising in electrocardiograms modeling. *AMRX. Appl. Math. Res. Express*, 2008, 2008.
- [44] Yves Bourgault, Marc Ethier, and Victor G. LeBlanc. Simulation of electrophysiological waves with an unstructured finite element method. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 37(4) :649–661, 2003.
- [45] S. C. Brenner and L. R. Scott. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*, volume 15 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer New York, 2008.
- [46] F. Brezzi, K. Lipnikov, and M. Shashkov. Convergence of the mimetic finite difference method for diffusion problems on polyhedral meshes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 43(5) :1872–1896, 2005.
- [47] N.F. Britton. *Reaction-Diffusion Equations and their Applications to Biology*. Academic Press Inc., 1986.
- [48] Xing Cai and Glenn Terje Lines. Full-scale simulation of cardiac electrophysiology on parallel computers. In *Numerical solution of partial differential equations on parallel computers*, volume 51 of *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.*, pages 386–411, 478–479. Springer, Berlin, 2006.
- [49] D.G. Schaeffer C.C. Mitchell. A two-current model for the dynamics of cardiac membrane. *Bulletin Math Bio*, 65 :767–793, 2003.

- [50] P Colli-Franzone, L. Guerri, and E. Magenes. Oblique double layer potentials for the direct and inverse problems of electrocardiology. *Mathematical Biosciences*, 1984.
- [51] P. Colli Franzone, L. Guerri, and S. Rovida. Wavefront propagation in an activation model of the anisotropic cardiac tissue : Asymptotic analysis and numerical simulations. *J. Math. Biol.*, 28(2) :121–176, 1990.
- [52] P. Colli Franzone, L. Guerri, and C. Viganotti. Oblique dipole layer potentials applied to electrocardiology. *J. Math. Biol.*, 17(1) :93–124, 1983.
- [53] Piero Colli Franzone, Peter Deuffhard, Bodo Erdmann, Jens Lang, and Luca F. Pavarino. Adaptivity in space and time for reaction-diffusion systems in electrocardiology. *SIAM J. Sci. Comput.*, 28(3) :942–962 (electronic), 2006.
- [54] Piero Colli Franzone, Luciano Guerri, Micol Pennacchio, and Bruno Taccardi. Spread of excitation in 3-D models of the anisotropic cardiac tissue. II. Effects of fiber architecture and ventricular geometry. *Math. Biosci.*, 147(2) :131–171, 1998.
- [55] Piero Colli-Franzone, Luciano Guerri, and Bruno Taccardi. Modeling ventricular excitation : axial and orthotropic anisotropy effects on wavefronts and potentials. *Math. Biosci.*, 188 :191–205, 2004. Topics in biomathematics and related computational problems.
- [56] Piero Colli Franzone, Luca F. Pavarino, and Simone Scacchi. Dynamical effects of myocardial ischemia in anisotropic cardiac models in three dimensions. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 17(12) :1965–2008, 2007.
- [57] P Colli Franzone and G. Savaré. Degenerate evolution systems modeling the cardiac electric field at micro- and macroscopic level. *Progress in nonlinear Differential Equations and Their Applications*, 50 :49–78, 2002.
- [58] S. Delcourte, K. Domelevo, and P. Omnes. A discrete duality finite volume approach to Hodge decomposition and div-curl problems on almost arbitrary two-dimensional meshes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 45(3) :1142–1174, 2007.
- [59] K. Domelevo and P. Omnes. A finite volume method for the laplace equation on almost arbitrary two-dimensional grids. *M2AN*, 39(6) :1203–1249, 2005.
- [60] J. Droniou. Error estimates for the convergence of a finite volume discretization of convection-diffusion equations. *J. Numer. Math.*, 11(1) :1–32, 2003.
- [61] D. Durrer, R.T. van Dam, G.E. Freud, M.J. Janse, F.L. Mijler, and R.C. Arzbacher. Total excitation of the isolated human heart. *Circulation*, 41 :899–912, 1970.
- [62] W. Einthoven. The different forms of the human electrocardiogram and their signification. *Lancet*, (1) :853–861, 1912.
- [63] W. Einthoven. Über die form des menschlichen electrocardiogramms. *Pfügers Archiv*, pages 101–123, march 1895.
- [64] Marc Ethier and Yves Bourgault. Semi-implicit time-discretization schemes for the bidomain model. *SIAM J. Numer. Anal.*, 46(5) :2443–2468, 2008.
- [65] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. *Handbook of Numerical Analysis*, chapter Finite Volume Methods. Elsevier, North-Holland, 2000.
- [66] R. Eymard, M. Gutnic, and D. Hillhorst. The finite volume method for Richards equation. *Comput. Geosci.*, 3 :259–294, 1999.

- [67] Flavio Fenton and Alain Karma. Vortex dynamics in three-dimensional continuous myocardium with fiber rotation : Filament instability and fibrillation. *Chaos*, 8 :20–47, 1998.
- [68] R.A. FitzHugh. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membran. *Biophys. J.*, 1 :445–466, 1961.
- [69] P. Colli Franzone and L. F. Pavarino. A parallel solver for reaction-diffusion systems in computational electrocardiology. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 14(6) :883–912, 2004.
- [70] P. Colli Franzone, L. F. Pavarino, and G. Savare. *Complex Systems in Biomedicine*, chapter Computational Electrocardiology : mathematical and numerical modeling, pages 187–241. Springer-Verlag, 2006.
- [71] P. Colli Franzone, L. F. Pavarino, S. Scacchi, and B. Taccardi. Modeling ventricular repolarization : effects of transmural and apex-to-base heterogeneities in action potential durations. *Math. Biosci.*, 214(1-2) :140–152, 2008.
- [72] P. Colli Franzone, L. F. Pavarino, and B. Taccardi. Simulating patterns of excitation, repolarization and action potential duration with cardiac bidomain and monodomain models. *Mathematical Biosciences*, 197(1) :35–66, 2005.
- [73] P. Colli Franzone, L. F. Pavarino, and B. Taccardi. Effects of transmural electrical heterogeneities and electrotonic interactions on the dispersion of cardiac repolarization and action potential duration : a simulation study. *Math. Biosci.*, 204(1) :132–165, 2006.
- [74] T. Gallouët, R. Herbin, and M.-H. Vignal. Error estimates on the approximate finite volume solution of convection diffusion equations with general boundary conditions. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 37(6) :1935–1972, 2000.
- [75] D. Henry. *Geometric Theory Of Semilinear Parabolic Equations*. Springer-Verlag, LNM 840, 1981.
- [76] R. Herbin. An error estimate for a finite volume scheme for a diffusion-convection problem on a triangular mesh. *Numerical Method For Partial Differential Equations*, 11 :165–173, 1995.
- [77] R. Herbin and F. Hubert. Benchmark on discretization schemes for anisotropic diffusion problems on general grids. In *Finite Volume For Complex Applications, Problems And Perspectives. 5th International Conference*, pages 659–692. London (UK), Wiley, 2008.
- [78] F. Hermeline. A finite volume method for the approximation of diffusion operators on distorted meshes. *Journal of Computational Physics*, 160(2) :481–499, 2000.
- [79] F. Hermeline. Approximation of 2-d and 3-d diffusion operators with variable full tensor coefficients on arbitrary meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(21) :2497–2526, 2007.
- [80] A.L. Hodgkin and A.F. Huxley. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. *J. Physiol*, 177 :500–544, 1952.
- [81] J. Keener and J. Sneyd. *Mathematical Physiology*. Springer (New York), 1998.
- [82] C. Le Potier. Schéma volumes finis monotone pour des opérateur de diffusion fortement anisotropes sur des maillages des triangles non structurés. *C.R. Acad. Sci. Paris, Sér. I*(341) :787–792, 2005.

- [83] C. Le Potier. Schéma volumes finis pour des opérateur de diffusion fortement anisotropes sur des maillages non structurés. *C.R. Acad. Sci. Paris, Sér. I*(340) :921–926, 2005.
- [84] G.T. Lines, M.L. Buist, A.J. Grottum, J. Sundnes, and A. Tveito. Mathematical models and numerical methods for the forward problem in cardiac electrophysiology. *Comput. Visual. Sci.*, 5 :215–239, 2003.
- [85] C. Luo and Y. Rudy. A dynamic model of the cardiac ventricular action potential - simulations of ionic currents and concentration changes. *Circulation Research*, 74 :1071–1097, 1994.
- [86] C.H. Luo and Y. Rudy. A model of the ventricular cardiac action potential : depolarization, repolarization, and their interaction. *Circ. Res.*, 68 :1501–1526, 1991.
- [87] J. Malmivuo and R. Plonsey. *Bioelectromagnetism - Principles and Applications of Bioelectric and Biomagnetic Fields*. Oxford University Press, 1995.
- [88] M.P. Nash and A.V. Panfilov. Electromechanical model of excitable tissue to study reentrant cardiac arrhythmias. *Progress in Biophysics and Molecular Biology*, 85(2-3) :501–522, 2004.
- [89] J. C. Neu and W. Krassowska. Homogenization of syncytial tissues. *Crit. Rev. Biomed. Eng.*, 21 :137–199, 1993.
- [90] R. A. Nicolaides. Direct discretization of planar div-curl problems. *SIAM, J. Numer. Anal.*, 29(1) :32–56, 1992.
- [91] R. A. Nicolaides and D.-Q. Wang. Convergence analysis of a covolume scheme for Maxwell’s equations in three dimensions. *Math. Comput.*, 67(223) :947–963, 1998.
- [92] R. A. Nicolaides and X. Wu. Covolume solutions of three-dimensional div-curl equations. *SIAM, J. Numer. Anal.*, 34(6) :2195–2203, 1997.
- [93] M. Pennacchio, G. Savaré, and P. Colli Franzone. Multiscale modeling for the bioelectric activity of the heart. *SIAM J. Math. Anal.*, 37 :1333–1370, 2005.
- [94] C. Pierre. *Modélisation et simulation de l’activité électrique du coeur dans le thorax, analyse numérique et méthodes de volumes finis*. PhD thesis, Université de Nantes, 2005.
- [95] J. Qian, Y.T. Zhang, and H.K. Zhao. Fast sweeping methods for eikonal equations on triangulated meshes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 45 :83–107, 2007.
- [96] J.M. Roger and A.D. McCulloch. A collocation-Galerkin finite element model of cardiac action potential propagation. *IEEE Trans. Biomed. Engr.*, 41 :743–757, 1994.
- [97] Y. Saad. *Iteratives Methods for Sparse Linear Systems*. Y. Saad, 2nd ed. 2000.
- [98] M. Sermesant. *Modèle électromécanique du coeur pour l’analyse d’image et la simulation*. PhD thesis, Université de Nice Sophia-Antipolis, 2003.
- [99] J. Sethian. *Level Set Methods and Fast-Marching Methods*. Cambridge University Press, 1999.
- [100] S. Silbernagl and a. Despopoulos. *Atlas de poche de physiologie*. Médecine - Sciences. Flammarion, 2e édition française edition, 1992.
- [101] J. Smoller. *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*, volume 258 of *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Springer, 2nd ed., 1994. ISBN : 978-0-387-94259-9.

- [102] J. Sundnes, G. T. Lines, X. Cai, B. F. Nielsen, K.-A. Mardal, and A. Tveito. *Computing the electrical activity in the heart*, volume 1 of *Monographs in Computational Science and Engineering*. Springer-Verlag, Berlin, 2006.
- [103] K.H. Ten Tusscher, D. Noble, P.J. Noble, and A.V. Panfilov. A model for human ventricular tissue. *Am. J. Physiol. Heart. Circ. Physiol.*, 286(4), 2004.
- [104] L. Tung. *A Bidomain Model for Describing Ischemic Myocardial D.C. Potentials*. PhD thesis, M.I.T., 1978.
- [105] A. Tveito and G. T. Lines. A condition for setting off ectopic waves in computational models of excitable cells. *Math. Biosci.*, 213(2) :141–150, 2008.
- [106] M. Veneroni. Reaction-diffusion systems for the macroscopic bidomain model of the cardiac electric field. *Nonlinear Anal. Real World Appl.*, available online 2007.
- [107] J.-P. Vila and P. Villedieu. Convergence of an explicit finite volume scheme for first order symmetric systems. *Numer. Math.*, 94(3) :573–602, 2003.
- [108] A. D. Waller. A demonstration on man of electromotive changes accompanying the heart’s beat. *J Physiol (London)*, (8) :229–234, 1887.
- [109] Y.T. Zhang, H.K. Zhao, and J. Qian. High order fast sweeping methods for static Hamilton-Jacobi equations. *Journal of Scientific Computing*, 29 :25–56, 2006.
- [110] H.K. Zhao. A fast sweeping method for eikonal equations. *Math. Comp.*, 74 :603–627, 2005.
- [111] B. Zinner. Stability of travelling wavefronts for the discrete nagumo equations. *SIAM J. Math. Anal.*, 22(4), 1991.